物理数学ノートII

高橋　康　著

講談社サイエンティフィク

は し が き

前巻“物理数学ノートＩ”では鷹揚数学のほんの一部を紹介した．この巻では，量子力学と場の理論でよく使われる鷹揚数学のうち，行列，角運動量，散乱問題，調和振動子と粒子像，変分法を簡単にまとめてみたが，話が少々むずかしくなったようである．前巻と同じく，やはり大学院学生の質問に答えているうちにできあがったノートが基礎になっている．

上の，はじめの３つの課題にたいしては，いろいろと成書が出ているが，どの本も大きすぎて忙しい大学院の学生には，それらをいちいち読んでいるエネルギーも時間もなかなかできないと思う．実際に研究を始めると，どっちみち自分の数学的知識の不足を痛感することになるのが常である．そのときには，やはり専門に応じて大きな成書を詳読しなければならなくなる．このノートが，それまでの一時的橋渡しの役割を果たすことができることを願っている．

調和振動子と粒子像については，これに焦点をあわせて書かれた教科書は少ない．最後の変分法は，例によって私の独創的なノートを紹介したものである．誰でもが知っていなければならないといったものではない．何かのお役にたてば幸いである．

このノートを執筆中，いつものように，“最知己的好朋友”杜兆華の暖かい友情とサポートがあったことを明記し，心からの感謝の意を表したい．

1993 年 8 月

高橋 康

エドモントンにて

目　　　次

0.　書斎のすみの紙くずかご

前巻“物理数学ノートⅠ”に続いてこんな本をまた書くことになった．前巻（以下ノートⅠ）を書く動機を与えてくれた例の学生A君に加えて，私の部屋には，今年はもう一人，平気で，全く初等的な質問を持ってくる大学院生，Bさんが現われるようになった．Bさんはなかなかインテリジェントな質問を持ってはくるが，残念ながら，どうも技術的なバックグラウンドがたりないようである．やはり，インテリジェンスというものは，物理をやるうえに必要なものかどうかわからなくなってしまう．少なくとも十分条件ではないようである．では，それは必要条件か？

ある読者がご親切に，寺田寅彦先生の随筆集の中から，“科学者とあたま”という記事のコピーを私のところに送ってくださった．読んでみると，なかなかおもしろい．6ページあるから，ここに引用するわけにはいかないが，結論は，科学者というものは，頭がよいだけではだめで，同時に頭が悪くなければいけないらしい．つまり一人で二役演じなければいけないようである．

では，私自身の意見はと問われると，何と答えたらよいであろうか？　一人二役演じるのは凡人のなしうる技ではないから，各自どちらかに決めておいたほうがよい．それよりも，どうせこんなことは自分の意志で決まるわけではないのだから，気にしないでいたほうがよい．頭のいい人が頭の悪い人のまねをするわけにはいかないだろうし，その逆はさらにむずかしい．すぐ

ばれてしまう．寺田先生のご意見自体には全然異論はないが，“そんなことはDNAに任せておいて，まあ気にせず，凡なる人の子は，大いに手と口と頭を使って奮戦してみること”ではないかしらと思う．

手と口？　それは，こういう意味である．少々疑問に思ったら，すぐ紙と鉛筆を取り出して，納得のいくまで自分の手を使ってやってみることである．だいたい何を基本にし，何を主張するのか，そしてその途中をどうやって埋めていくのかということを整理する．そうしているうちに，書斎のすみの紙くずかごはいっぱいになる．ある程度ことが判明したら，まわりにいる同僚や学生をつかまえて，自分の理解が一人よがりではなく，他人にも妥当なものか話してみるとよい．科学が人間の基本的なアクティビティーの1つだとすると，コミュニケーションが基礎になることは明らかであろう（まわりに同僚のいない独学者は，何といってもこの点たいへん不利である）．

A君がわからないわからない，と言っていることをよくみると，どうも手の動かし方がたりないようである．本を読んで頭でわかろうとしないで，本を読みながら，紙と鉛筆をうんと使って手に理解させるとよい．これはDNAに関係なく，自分の意志だけでコントロールできることである．

Bさんのほうは，手もよく動くし，論理的な理解も立派なものだが，残念ながら年期がたりない．あんまり才媛で，どんどん進級してきてしまったらしい．根がしっかりできないうちに早く成長した樹を思わせる．

A君とBさんとが，私の部屋に持ち込んできた質問に答えながら，そのつどワープロに打ち込んでおいたノートが大分たまってきた．今まで私自身，はずかしながら，いいかげんに理解したまま長年講義してきた問題についても，私なりに考えてみるよい機会であった．

VI章では，量子力学を勉強するときにどうしても必要な行列の理論を，かんたんにまとめた．VII章で，その応用として量子力学における角運動量の取り扱いを復習した．量子力学，特にその物理的解釈を知らなくても，その雰囲気に慣れるために，行列の演習をしておくのに適当であろう．VIII章でも同じく，量子力学を知らなくても（もちろん知っているにこしたことはな

いが)，ノートIで学んだGreen関数の応用問題として，波の散乱をどう取り扱うかを議論した．以上の3つの章に含まれる話題は，量子力学を勉強する場合，ぜひ必要であろう．

IX章では，場を調和振動子に分解する手法を紹介したが，それは現代の粒子像が調和振動子を基礎としているからである．将来，場の理論でも勉強しようという場合には，この章の論議は不可欠であろう．

X章の変分法の話は，ぜひ知っておかなければならないといったものではない．量子力学で近似法を習うとき変分法が出てくるが，これは近似解を得るためにしか使えないような方法なのであろうかということが，私自身にとって疑問であった．正確な解を得るために使えないような手法が，近似解を得るために有効であるというのは，私にとっては不可思議であったので，自分なりに納得してフロッピーに収めておいたものを，ここに紹介した．つまりこの章の議論は，伝統的なものではなく，全くの自己流である．したがって，あまり技術的な点にこだわらず，変分法という手法の底を流れるアイディアだけをくみ取っていただきたい．

VI. 行列および行列式

§1. はじめに

量子力学では，運動量とか角運動量とかいった物理量は，状態ベクトルに作用する演算子である．演算子の具体的なものが，今から勉強する行列である．量子力学では無限個の要素からできた行列を問題にするが，ここでは有限個の要素からできた行列を考える．有限個の要素からできた行列において成り立つ定理は，無限個の要素から成り立つ行列に対しては必ずしも成り立つ保証はない．しかし，この点を注意しながら転用すれば，十分役に立つことは言うまでもないことである．

ここでは議論を具体的に進めるために，あまり抽象的な定義や証明などは並べないで，できるかぎり 2 行 2 列か 3 行 3 列の行列の場合の例をあげながら話をするように努める．

§2. 行列のかけ算，たし算など

行列に関するたし算とかけ算は周知であろう．特に A と B とが“同じ大きさ”の正方行列であるときは，話は簡単である．

いま $n \times n$ 個の数 a_{ij} $(i, j = 1, 2, ..., n)$ を,

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots\cdots & & \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \tag{2.1}$$

のように並べたものを行列 A とよぶ. つまり a_{ij} の最初の添え字は水平の行を, 第2の添え字は垂直の列を示す. 簡単に記号的に,

$$A = [a_{ij}] \tag{2.2}$$

と書くこともある. a_{ij} は実数でも複素数でもよい. 以下, ほとんどの場合, 上のような正方形の行列のみを考える. $a_{11}, a_{22}, ..., a_{nn}$ を行列 A の**対角要素**とよぶ. 行列 (2.1) や (2.2) を簡単に $n \times n$ **の行列**ということもある.

2つの行列のたし算は, 各行列要素をたしたもので定義する. すなわち,

$$A + B = [a_{ij} + b_{ij}] \tag{2.3}$$

例はあとで挙げる (行列のたし算の詳しいことは VII 章参照).

行列 A と B をかけるということは,

$$AB = \left[\sum_k a_{ik} b_{kj}\right] \tag{2.4}$$

を作ることである. したがって, 一般には AB と BA とは等しくない. これも例はあとで挙げる. もし,

$$AB = BA \tag{2.5}$$

なら, 行列 A と B は**交換可能**あるいは**可換**であるという.

行列 A に普通の数 α をかけるということは,

$$\alpha A = [\alpha a_{ij}] \tag{2.6}$$

すなわち A のすべての行列要素を α 倍する.

行列のわり算はどうするか? これは少々複雑で, 行列式および余因子というものを定義しておかなければならない.

行列 A の**行列式** (determinant) は通常3通りの書き方がある. いずれでも便利なものを使えばよいが,

$$\det(A) \equiv |a_{ij}| \equiv \Delta_A \tag{2.7}$$

の 3 通りで，それらは，

$$= \sum_{i_1,i_2,\cdots,i_n=1}^{n} \varepsilon_{i_1 i_2 \cdots i_n} a_{i_1 1} a_{i_2 2} a_{i_3 3} \cdots a_{i_n n} \tag{2.8}$$

ということである．ただし，n 個の添え字をもった ε というのは，すべての添え字に対して反対称な **Levi Civita の全反対称量**で，便宜上，

$$\varepsilon_{12\cdots n} = 1 \tag{2.9}$$

ととる（ノート I の IV 章で，3 個の足をもった全反対称量を導入した）．また，例によって，くり返した添え字に対しては，1 から n まで和をとるという **Einstein の便法**を用いる．式 (2.8) をもう少し詳しく書くと，

$$\begin{aligned}\Delta_A = \ & a_{11}\{\varepsilon_{1 i_2 i_3 \cdots i_n} a_{i_2 2} a_{i_3 3} \cdots a_{i_n n}\} \\ & + a_{21}\{\varepsilon_{2 i_2 i_3 \cdots i_n} a_{i_2 2} a_{i_3 3} \cdots a_{i_n n}\} \\ & + a_{31}\{\varepsilon_{3 i_2 i_3 \cdots i_n} a_{i_2 2} a_{i_3 3} \cdots a_{i_n n}\} \\ & + \cdots + a_{n1}\{\varepsilon_{n i_2 i_3 \cdots i_n} a_{i_2 2} a_{i_3 3} \cdots a_{i_n n}\}\end{aligned} \tag{2.8$'$}$$

となる．この表現をよくながめて，{ } の外にくくりだした n 個の係数 $a_{11}, a_{21}, \cdots, a_{n1}$ は，もう，どの { } の中にもはいっていないことを見逃さないように．しかし，式 (2.8) も式 (2.8′) もこれでは抽象的でわかりにくいから，2×2 と 3×3 の場合に具体的に書いておくと：

2×2 の場合，

$$\Delta_A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = \varepsilon_{ij} a_{i1} a_{j2} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \tag{2.10}$$

ただし，

$$\varepsilon_{12} = -\varepsilon_{21} = 1 \tag{2.10$'$}$$

を用いた．

3×3 の場合には，

$$\Delta_A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = \varepsilon_{ijk} a_{i1} a_{j2} a_{k3}$$

$$= a_{11}\begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} - a_{12}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} + a_{13}\begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} \qquad (2.11)$$

$$= a_{11}(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) - a_{21}(a_{12}a_{33} - a_{13}a_{32})$$
$$+ a_{31}(a_{12}a_{23} - a_{13}a_{22}) \qquad (2.11')$$

ここでも ε_{ijk} の全反対称性を用いた．式 (2.11) をみれば見当がつくが，一般の場合の式 (2.8′) の a_{i1} $(i = 1, 2, \cdots, n)$ の係数は，A から，第 i 行第 1 列を取り除いた $(n-1) \times (n-1)$ の行列の行列式に，$(-1)^{1+i}$ をかけたものになっている．そしてこの場合，すべての係数は ε の全反対称性によって，もはや a_{i1} には依存しないから，

$$a_{i1}\text{の係数} = \frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{i1}} \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \qquad (2.12)$$

である．この記号を用いると，式 (2.8′) の展開は，

$$\Delta_A = a_{i1}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{i1}} \qquad (2.13)$$

となる．i については 1 から n までたしてある．いま a_{ij} に対して，

$$\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{ij}} \qquad (2.14)$$

のことを，a_{ij} の**余因子** (cofactor) とよぶ．これを使うと，行列式は，次のように n 個の異なった形に書くことができる：

$$\Delta_A = a_{i1}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{i1}} = a_{i2}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{i2}} = \cdots = a_{in}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{in}} \qquad (2.15)$$

さらに，

$$\Delta_A = a_{1i}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{1i}} = a_{2i}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{2i}} = \cdots = a_{ni}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{ni}} \qquad (2.16)$$

と書くこともできる．一般的な場合に証明するのはかえって抽象的でわかりにくいから，ここではやらないが，3 行 3 列の場合をやってみて納得しておくのがよいと思う．

もし，

$$a_{ik}\frac{\partial\ \Delta_A}{\partial\ a_{jk}} \quad (i \neq j) \qquad (2.17)$$

を作ってみると，これは恒等的に 0 になってしまう．したがって，式 (2.15) と式 (2.16) と，この式をいっしょにして 1 つの式で書くと，

$$a_{ik}\frac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{jk}} = \Delta_A\delta_{ij} \tag{2.18}$$

となる．ここで i と j は1から n までの勝手な値をとる． a_{ij} の余因子とは，要するに， A から i 行と j 列を取り除いた残りの $(n-1)\times(n-1)$ の行列から作った行列式に，符号 $(-1)^{i+j}$ をかけたものである．すなわち，

$$\frac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{ij}} = (-1)^{i+j}\times\left|A_{ij}\text{から } i \text{ 行 } j \text{列をのぞいた } (n-1)\times(n-1) \text{ の行列}\right| \tag{2.19}$$

である．

いま式 (2.19) を j 行 i 列において作った行列を Y とすると（ここで i と j をひっくり返したことに注意），すなわち，

$$Y = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{11}} & \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{21}} & \cdots & \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{n1}} \\ \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{12}} & \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{22}} & \cdots & \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{n2}} \\ & \cdots\cdots & & \\ \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{1n}} & \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{2n}} & \cdots & \dfrac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{nn}} \end{bmatrix} \tag{2.20}$$

とおくと，式 (2.18) によって，

$$AY = YA = I\Delta_A \tag{2.21}$$

である．ただし I とは， n 行 n 列の**単位行列**で，

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ & & \cdots\cdots & & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{2.22}$$

である．式 (2.21) が，行列のわり算を定義するするときに重要な式なのである．

式 (2.21) を見ると，

$$A^{-1} = Y\frac{1}{\Delta_A} \tag{2.23}$$

とおけばよいことがわかる．つまり行列 A で割るということは，式 (2.23) をかけることと同じである．もちろん，

$$\det(A) \neq 0 \tag{2.24}$$

でなければ式 (2.23) は意味をなさない．そうすると式 (2.21) により，

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I \tag{2.25}$$

となる．言い換えると，行列 A でわり算ができるのは式 (2.24) が成り立つときで，そのとき **A の逆行列**（これも $n \times n$ 行列）を式 (2.23) で定義する．

なお，行列式の定義 (2.8) によると，行列式に対する重要かつ便利な関係，

$$\det(A)\det(B) = \det(AB) \tag{2.26}$$

が得られる（演習問題参照）．したがって式 (2.25) より，

$$\det(A)\det(A^{-1}) = 1 \tag{2.27}$$

$$\Delta_A \Delta_{A^{-1}} = 1 \tag{2.27$'$}$$

が得られる．また式 (2.6) によると，

$$\det(\alpha A) = \alpha^n \det(A) \tag{2.28}$$

となることに注意．

また，逆行列について重要な関係

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1} \tag{2.29}$$

も容易に確かめられる（A^{-1} および B^{-1} が存在するとして）．

最後に 2 行 2 列と 3 行 3 列の場合の Y を具体的に書いておく．2 行 2 列の行列を，

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \tag{2.30}$$

とすると，Y は，

$$Y = \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix} \tag{2.31}$$

となる．同様に 3 行 3 列の場合には少々複雑だが，

$$
Y = \begin{bmatrix} \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{12} & a_{13} \\ a_{22} & a_{23} \end{vmatrix} \\ -\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{21} & a_{23} \end{vmatrix} \\ \begin{vmatrix} a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & -\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{31} & a_{32} \end{vmatrix} & \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \end{bmatrix} \tag{2.32}
$$

である．

§3. 転置行列，直交行列など

具体的な例を挙げる前にもう少し我慢して，2，3の定義を知っておいてもらわなければならない．というのは，物理に出てくる行列はあまり勝手なものではなく，ある性質をもったものに限られるからである．

いま行列 (2.1) に対して，行と列を交換した

$$
A^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & a_{32} & \cdots & a_{n2} \\ & & \cdots\cdots & & \\ a_{1n} & a_{2n} & a_{3n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \tag{3.1}
$$

を，A の**転置行列** (transposed matrix) とよぶ．これについては，

$$
(AB)^{\mathrm{T}} = B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} \tag{3.2}
$$

が成り立つ（演習問題参照）．

もし，

$$
A = A^{\mathrm{T}} \tag{3.3}
$$

なら，A を**対称行列** (symmetric matrix)

$$
A = -A^{\mathrm{T}} \tag{3.4}
$$

なら， A を**反対称行列** (antisymmetric あるいは skewsymmetric matrix) とよぶのは自然であろう．

転置行列の行列式は，もとの行列の行列式と同じである．これは定義 (2.8) から出る．すなわち，

$$\det(A) = \det(A^{\mathrm{T}}) \tag{3.5}$$

(式 (2.11') で行と列を交換してみよ)，また式 (2.28) によって，

$$\det(Y) = (\varDelta_A)^n \det(A^{-1}) = (\varDelta_A)^n \frac{1}{\varDelta_A} = (\varDelta_A)^{n-1} \tag{3.6}$$

である（もちろん $\varDelta_A \neq 0$ のときの話）．

直交行列 (orthogonal matrix) というのは，すべての行列要素が実数で

$$A^{-1} = A^{\mathrm{T}} \tag{3.7}$$

を満たすものをいう．すなわち直交行列は，

$$A^{\mathrm{T}}A = AA^{\mathrm{T}} = I \tag{3.8}$$

を満たす．これを**直交条件**ともいう．前巻 IV 章の 3 次元の回転を表す a_{ij} は，条件 (3.8) を満たすから，それは直交行列である．直交行列という名前はここから出たのであろう． n 次元のベクトルの，ある直交座標系での成分を x_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$ とすると，

$$x'_i = a_{ij}x_j \tag{3.9}$$

は， a_{ij} が条件 (3.8) を満たすとき，やはり同じベクトルの，回転した直交座標系での成分となる．そして両座標系でベクトルの長さは変わらない．

直交条件 (3.8) の両辺の行列式をとって式 (3.5) を用いると，

$$[\det(A)]^2 = 1 \tag{3.10}$$

すなわち

$$\det(A) = \pm 1 \tag{3.11}$$

となる．これは直交行列の特長で， $+1$ のほうを回転， -1 のほうを反転（または，反転を含む回転）ということは，ノート I の IV 章でみたところである．3 次元の回転のほうは 3 個のパラメーターで表すことができ，たとえば一般的に，

$$a_{ij} = (\varDelta_{ij} - e_ie_j)\cos\theta + e_ie_j + \varepsilon_{ijk}e_k\sin\theta \tag{3.12}$$

とおくことができる．ただし e_i $(i=1,2,3)$ は単位ベクトルの成分である．一般の $n\times n$ の直交行列の $\det(A)=1$ のほうは， $n(n-1)/2$ 個のパラメーターで表現できる（これは式 (3.8) の条件式の数から算出できる）．したがって， 4×4 の直交行列なら 6 個のパラメーターとなる．これが 4 次元の相対性理論で，3 個の空間回転のパラメーターと 3 個の速度成分を考える理由である．

次に重要なのは，互いに密接な関係にあるエルミート行列とユニタリー行列である．これらについては節を改めて勉強しよう．

§4. エルミート行列，ユニタリー行列など

複素数の要素からできている一般の行列を考える．行列要素 a_{ij} の複素共役 $(a_{ij})^*$ をとり，それらを行と列を逆にして並べて作った

$$A^\dagger = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & a_{31}^* & \cdots & a_{n1}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* & a_{32}^* & \cdots & a_{n2}^* \\ & & \cdots\cdots & & \\ a_{1n}^* & a_{2n}^* & a_{3n}^* & \cdots & a_{nn}^* \end{bmatrix} \tag{4.1}$$

を， A のエルミート共役 (Hermite conjugate) な行列という．容易にわかるように，

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \tag{4.2}$$

である．このままではもとの行列と別物だが，もし，

$$A = A^\dagger \tag{4.3}$$

が成り立つとき， A を**自己エルミート共役行列**，または簡単に， A はエルミートであるという．単にエルミート行列といったら，自己エルミート共役の行列を意味する．エルミート行列はおいおいわかるように，量子力学で特に重要である．その性質は §7 で詳しく述べるが，定義 (4.3) からすぐ出てくることは， A の対角要素はすべて実数，非対角要素は行と列を交換した

とき互いに複素共役になっているということである．したがって，一般にエルミート行列は，

$$A^\dagger = A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12}^* & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ & & \cdots\cdots & & \\ a_{1n}^* & a_{2n}^* & a_{3n}^* & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \tag{4.4}$$

となっており，対角要素 $a_{11}, a_{22}, \cdots, a_{nn}$ は全部実数である．エルミート行列はいくつたし合わせてもやはりエルミートである．ただし，2個のエルミート行列をかけ合わせたものは必ずしもエルミートではない．

ユニタリー行列 U というのは，その逆 U^{-1} が存在し，かつそれが U のエルミート共役行列 $U^\dagger$ に等しい行列をいう．すなわち，

$$U^\dagger = U^{-1} \tag{4.5}$$

を満たす行列を**ユニタリー行列**という．ユニタリー行列も量子力学で大活躍する．

ある行列 A を $U^\dagger$ と U ではさむことを，U で**ユニタリー変換**するという．すなわち，

$$A' = U^\dagger A U \tag{4.6}$$

は，A をユニタリー変換したものである．もしこの A がエルミートならば，A' もエルミートである．証明は簡単で，

$$(A')^\dagger = (U^\dagger A U)^\dagger = U^\dagger A^\dagger U = U^\dagger A U = A' \tag{4.7}$$

つまり，ユニタリー変換してもエルミート性は失われない．量子力学では力学量をエルミート演算子で表すから，それにユニタリー変換してもまた，同じくエルミートの力学量になる．ユニタリー変換は何度くり返してもやはりユニタリーである（演習問題）．ユニタリー変換の自由度を利用して問題を解こうというのである．ユニタリー変換は，古典力学における正準変換に対応する．

§ 5.　Pauli スピン行列と T 行列

今までかなり抽象的に話をしてきたので，ここで少し例を挙げて具体的に計算の練習をしよう．2 行 2 列の Pauli スピン行列

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{5.1}$$

と，前巻で導入した 3 行 3 列の $\boldsymbol{T}$ 行列

$$(T_i)_{jk} = -i\varepsilon_{ijk} \tag{5.2}$$

を考えよう．あるいは式 (5.2) を具体的に書くと，

$$T_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \quad T_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad T_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.2$'$}$$

である．

式 (5.1)，(5.2') を見ればすぐわかるように，すべてエルミートである．かつ σ_2, T_1, T_2, T_3 は反対称，σ_1, σ_3 は対称である．逆があるかどうかをみるために行列式を計算すると，

$$\det(\sigma_1) = \det(\sigma_2) = \det(\sigma_3) = -1 \tag{5.3}$$

$$\det(T_1) = \det(T_2) = \det(T_3) = 0 \tag{5.4}$$

となり，$\sigma_i\ (i = 1, 2, 3)$ には逆が存在するが，$T_i\ (i = 1, 2, 3)$ のほうには存在しないことは明らかである．まとめると Pauli スピン行列のほうは，

$$\sigma_1^{-1} = \sigma_1^\dagger = \sigma_1^{\mathrm{T}} = \sigma_1 \tag{5.5a}$$

$$\sigma_2^{-1} = \sigma_2^\dagger = -\sigma_2^{\mathrm{T}} = \sigma_2 \tag{5.5b}$$

$$\sigma_3^{-1} = \sigma_3^\dagger = \sigma_3^{\mathrm{T}} = \sigma_3 \tag{5.5c}$$

が成り立ち，$\boldsymbol{T}$ 行列のほうでは，

$$T_1^\dagger = -T_1^{\mathrm{T}} = T_1 \tag{5.6a}$$

$$T_2^\dagger = -T_2^{\mathrm{T}} = T_2 \tag{5.6b}$$

$$T_3^\dagger = -T_3^{\mathrm{T}} = T_3 \tag{5.6c}$$

が成り立つ.

行列のかけ算は，具体的な表現 (5.1), (5.2), (5.2′) を用いて計算するほかない．たとえば，

$$\sigma_1\sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{bmatrix} = i\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = i\sigma_3 \quad (5.7a)$$

$$\sigma_2\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{bmatrix} = -i\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = -i\sigma_3 \quad (5.7b)$$

同様にして，

$$\sigma_2\sigma_3 = -\sigma_3\sigma_2 = i\sigma_1 \quad (5.8a)$$

$$\sigma_3\sigma_1 = -\sigma_1\sigma_3 = i\sigma_2 \quad (5.8b)$$

$$\sigma_1\sigma_2 = -\sigma_2\sigma_1 = i\sigma_3 \quad (5.8c)$$

$$\sigma_1^2 = I \qquad \sigma_2^2 = I \qquad \sigma_3^2 = I \quad (5.9)$$

が得られる．これら 6 個の式をまとめると，コンパクトに，

$$\sigma_i\sigma_j - \sigma_j\sigma_i \equiv [\sigma_i,\ \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k \quad (5.10a)$$

$$\sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i \equiv \{\sigma_i,\ \sigma_j\} = 2\Delta_{ij} \quad (5.10b)$$

と書くことができる．式 (5.10) は (5.8), (5.9) と全く同等である (演習問題参照)．Pauli スピン行列では，上にみられるように，任意の 2 個をかけ合わせると，また Pauli スピン行列か 2 行 2 列の単位行列に戻る．$\boldsymbol{T}$ 行列のほうはことがやっかいである．たとえば，

$$T_1T_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.11a)$$

$$T_2T_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5.11b)$$

となり，両方ともこのままでは $\boldsymbol{T}$ 行列には戻らない．このことはあとで考える．ちょっとここで注意しておくことは，実は式 (5.11b) のほうは直接計算しないでも式 (5.11a) から得られる．それにはエルミート性の性質 (4.2) に

より，

$$(T_1T_2)^\dagger = T_2^\dagger T_1^\dagger = T_2T_1 \tag{5.12}$$

だから，式 (5.11a) のエルミート共役をとると式 (5.11b) になる．

同様にして計算すると，

$$T_2T_3 = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad T_3T_2 = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.13a}$$

$$T_3T_1 = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad T_1T_3 = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.13b}$$

$$T_1^2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad T_2^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad T_3^2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.13c}$$

が得られる．これらの関係を眺めてみると，任意の 2 個の積はもとの T 行列には戻らないが，たとえば，

$$T_1T_2 - T_2T_1 = iT_3 \tag{5.14}$$

で，一般には，

$$T_iT_j - T_jT_i \equiv [T_i, T_j] = i\varepsilon_{ijk}T_k \tag{5.15}$$

および

$$T_1^2 + T_2^2 + T_3^2 = 2I \tag{5.16}$$

また，たとえば，

$$T_1T_2T_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = i(I - T_2^2) \tag{5.17}$$

$$\{T_1,\ T_2\} = -\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.18a}$$

$$\{T_2,\ T_3\} = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.18b}$$

$$\{T_3,\ T_1\} = -\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{5.18c}$$

このように，T 行列では積のルールがかなり複雑になる．この場合には，

$$T_1,\ T_2,\ T_3,\ \{T_2,\ T_3\},\ \{T_3,\ T_1\},\ \{T_1,\ T_2\},\ T_1^2,\ T_2^2,\ T_3^2 \tag{5.19}$$

の 9 個をとると，任意の 2 個の積が，またこれら 9 個の線形結合になる．

賢明なる読者はすでにお察しのことと思うが，n 行 n 列のときには，n^2 個の行列を適当に選ぶと，それらのうちの 2 個の積がまたそれらの線形結合で表すことができる．そして，一般の n 行 n 列の行列は，常にこれらの n^2 個の行列の線形結合として表すことができる．2 行 2 列のときの例は，ノート I の付録で議論したとおりである．

Dirac の相対論的な波動方程式では，4 行 4 列の行列が活躍する．そのときは，したがって $4^2 = 16$ 個の基本的な行列が考えられ，その他の任意の 4 行 4 列の行列は，いつでもそれら 16 個の行列の線形結合として書くことができる．

§6. 2 行 2 列のユニタリー行列

ユニタリー性からくる制限を理解するために，ここで 2 行 2 列の場合を詳しくやってみよう．まず 2 行 2 列の行列を一般に，

$$U = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix} \tag{6.1}$$

とおく．$\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は複素数である．まず逆を求めると式 (2.23) により，

$$U^{-1} = \frac{1}{\alpha\delta - \beta\gamma}\begin{bmatrix} \delta & -\beta \\ -\gamma & \alpha \end{bmatrix} \tag{6.2}$$

ただし,

$$\alpha\delta - \beta\gamma \equiv \Delta \neq 0 \tag{6.3}$$

また,

$$U^\dagger = \begin{bmatrix} \alpha^* & \gamma^* \\ \beta^* & \delta^* \end{bmatrix} \tag{6.4}$$

したがって, U がユニタリーであるためには,

$$\delta = \Delta\alpha^* \tag{6.5a}$$

$$\beta = -\Delta\gamma^* \tag{6.5b}$$

$$\gamma = -\Delta\beta^* \tag{6.5c}$$

$$\alpha = \Delta\delta^* \tag{6.5d}$$

が満たされていなければならない. これから直ちにわかることは,

$$|\Delta|^2 = 1 \tag{6.6}$$

である. したがって,

$$\Delta \equiv e^{i\xi} \quad (\xi : \text{実数}) \tag{6.7}$$

とおくことができる. よって, ユニタリー行列の一般形は,

$$U = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -e^{i\xi}\beta^* & e^{i\xi}\alpha^* \end{bmatrix} \tag{6.8}$$

である. これを用いて逆にユニタリー性を確かめるのは容易であろう.

特に,

$$\Delta = 1 \quad (\xi = 0) \tag{6.9}$$

なる行列を, **単模行列** (unimodular matrix) という. 2行2列の, 単模ユニタリー行列の一般形は, したがって,

$$U = \begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{bmatrix} \tag{6.10}$$

となる. ただし,

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = \Delta = 1 \tag{6.11}$$

でなければならないから, 独立なパラメーターの数は3個となる (3次元の回転パラメーターの数は3であったことを思い出すとおもしろい).

この α と β（これらは式 (6.11) を満たす）を Cayley-Klein のパラメーターとよぶこともある（前巻 IV 章参照）.

同じく 2 行 2 列のユニタリー行列を，Pauli の行列を用いて調べておく．前に議論したように，任意の 2 行 2 列の行列は，Pauli の行列

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{6.12}$$

および単位行列

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.12$'$}$$

で展開することができる．任意の 2 行 2 列の行列を U とすると，

$$\begin{aligned} U &= a_0 I + i\{a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3\} \\ &\equiv a_0 I + i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma} = \begin{bmatrix} a_0 + ia_3 & a_2 + ia_1 \\ -a_2 + ia_1 & a_0 - ia_3 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{6.13}$$

と書くことができる．ここに，a_0, a_1, a_2, a_3 は一般には複素数で，$\boldsymbol{a}$ の前に出した i は便宜にすぎない．U が与えられると，$a_0, \boldsymbol{a}$ はユニークに決まる．

さて，U がユニタリーであるためには，a_0 や $\boldsymbol{a}$ がどのようなものであったらよいか？　まず式 (6.13) のエルミート共役を作ると，Pauli 行列はすべてエルミートだから，

$$U^\dagger = a_0^* I - i\boldsymbol{a}^*\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{6.14}$$

一方，U の逆は式 (2.23) を用いるかまたは直接計算により，

$$U^{-1} = \frac{1}{a_0^2 + \boldsymbol{a}^2}\{a_0 I - i\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}\} \tag{6.15}$$

となる．U がもしユニタリーなら式 (6.14) と (6.15) は同等でなければならない．したがって，

$$a_0^* = \frac{1}{\varDelta}a_0 \qquad \boldsymbol{a}^* = \frac{1}{\varDelta}\boldsymbol{a} \tag{6.16}$$

ただし，

$$\varDelta \equiv a_0^2 + \boldsymbol{a}^2 \neq 0 \tag{6.17}$$

である．式 (6.16) から，

$$|\varDelta|^2 = 1 \tag{6.18}$$

だから,

$$\Delta \equiv e^{i\xi} \quad (\xi : \text{実数}) \tag{6.19}$$

$$a_0 \equiv e^{i\frac{1}{2}\xi}\alpha_0 \tag{6.20}$$

$$\boldsymbol{a} \equiv e^{i\frac{1}{2}\xi}\boldsymbol{\alpha} \tag{6.20'}$$

とおくと，式 (6.16) より， α_0, α_i $(i = 1, 2, 3)$ は実数でなければならない．したがって，2 行 2 列のユニタリー行列の一般形は,

$$U = \{\alpha_0 I + i\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma}\}e^{i\frac{1}{2}\xi} \tag{6.21}$$

である．これが単模ユニタリー行列なら,

$$\xi = 0 \tag{6.22}$$

で，この場合前に求めた形 (6.10) と一致する．

2 行 2 列のユニタリー行列が簡単に 3 個の Pauli 行列と単位行列で書かれたのは，Pauli 行列の積のルールが簡単だったからで，一般の $n \times n$ の行列では適当に選ばれた $n \times n$ 個の行列の線形結合になる．なお，§7 の式 (7.9), (7.10) を見よ．

§7. エルミート行列とユニタリー行列の重要な性質

先程もいったように，エルミートやユニタリー行列は量子力学で特に重要だから，ここでそれらの性質をまとめておくが，いちいち証明はやらない．証明が気になったら，自分で簡単な場合をやってみて納得しておくか，行列の成書を参照してほしい．たとえば，私の書棚には，藤原松三郎著 “行列および行列式　改訂版” (岩波全書) がある．

以下， H や K をエルミート行列， U や S をユニタリー行列であると約束しておく．すなわち,

$$H = H^\dagger \quad K = K^\dagger \tag{7.1}$$

$$U^{-1} = U^\dagger \quad S^{-1} = S^\dagger \tag{7.2}$$

が常に成り立っているとする．

まず，特性根を定義しておくと：

ある数 λ （実数かもしれないし，複素数かもしれない）を用いて，ある行列 A に対して $\lambda I - A$ を作る．この行列式 $\det(\lambda I - A)$ は，λ について n 次の多項式である．これを行列 A の**特性多項式** (characteristic polynomial) という．この多項式をゼロとおいた式，つまり，

$$\det[\lambda I - A] = 0 \tag{7.3}$$

を A の**特性方程式** (characteristic equation) または**永年方程式** (secular equation) という*．この方程式 (7.3) の n 個の根を，A の**特性根** (characteristic root) と称する．これは与えられた行列 A に特有な n 個の数の組である．これについて次の定理が成り立つ．

(1) エルミート行列の特性根はすべて実数である．

(2) エルミート行列の固有値は特性根に一致する．すなわち，

$$H|i\rangle = \lambda_i|i\rangle \tag{7.4}$$

という固有値問題を解くと，n 個の固有値 λ_i $(i = 1, 2, \cdots, n)$ と n 個の特性根式

$$\det[\lambda I - H] = 0 \tag{7.5}$$

は完全に一致する．したがって，エルミート行列のすべての固有値は実数である．ただし，式 (7.4) で $|i\rangle$ と書いたのは n 行 1 列の行列で，

$$|i\rangle = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{7.6}$$

のような形をしている．式 (7.4) を満たす固有値 λ_i の数 n 個だけ異なった n 行 1 列の行列が存在する．$|i\rangle$ を，固有値 λ_i に属する**固有ベクトル**という．

(3) エルミート行列 H をユニタリー変換したものはやはりエルミート行列である．このことは前に議論した．

(4) エルミート行列の固有値はユニタリー変換で変わらない．これを見るのは容易で，

---

* 後者の名前は，特に A の要素がすべて実数のとき用いられる．

$$H' = U^{\dagger}HU \tag{7.7}$$

としたとき，

$$H'U^{\dagger}|i\rangle = U^{\dagger}HUU^{\dagger}|i\rangle = U^{\dagger}H|i\rangle = \lambda_i U^{\dagger}|i\rangle \tag{7.8}$$

この式は，H' の固有値も λ_i で，その固有ベクトルは，$U^{\dagger}|i\rangle = |i\rangle'$ であるという式である．

(5) H の特性方程式の解はいつでも実だから，$I + iH$ および $I - iH$ にはいつでも逆がある．これをみるには，$\det(I + iH)$ が 0 にならないことをみればよいが，これは特性方程式が実根しかもたないことから明らかである．

(6) H がエルミートのとき

$$U = (I - iH)(I + iH)^{-1} = I + 2\sum_{n=1}^{\infty}(-iH)^n \tag{7.9}$$

$$U = \exp(iH) \tag{7.10}$$

はユニタリーである．ただし，指数関数は級数展開

$$\exp(iH) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(iH)^n \tag{7.11}$$

で定義する．2 個のユニタリー行列の積はユニタリーである．したがって，

$$S = (I - iH)(I + iH)^{-1}(I - iK)(I + iK)^{-1} \tag{7.12}$$

もユニタリーである．

(7) U がユニタリーなら，

$$H = i(I - U)(I + U)^{-1} = i\left\{I + 2\sum_{n=1}^{\infty}(-U)^n\right\} \tag{7.13}$$

はエルミートである．

(8) エルミート行列に対して，ユニタリー行列 U を適当に選び，

$$U^{\dagger}HU = H_D \tag{7.14}$$

とすることができる．ただし H_D 対角行列で，対角線上に固有値 λ_i ($i = 1, 2, \cdots, n$) が並んだものである．エルミート行列はいつでもユニタリー変換で対角化されるが，このことは，非エルミート行列は対角化できないという意味ではない．演習問題 16 を見よ．

(9)

$$H|i\rangle = \lambda_i|i\rangle \quad (i = 1, 2, \cdots, n) \tag{7.15}$$

の異なった固有値に属する固有ベクトル $|i\rangle$ と $|j\rangle$ （λ_i と λ_j とは等しくない）は直交する．直交するという意味はノート I の II 章で説明したが，スカラー積が 0 になるということで，この場合，

$$\langle j|i\rangle = 0 \qquad (\lambda_i \neq \lambda_j) \tag{7.16}$$

ただし，$\langle j|$ とは $|j\rangle$ のエルミート共役で，

$$|j\rangle = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \tag{7.17}$$

に対し，

$$\langle j| = [\, y_1^* \; y_2^* \;\; \cdots \;\; y_n^* \,] \tag{7.18}$$

なる，1 行 n 列の行列である．したがって，

$$\langle j|i\rangle = y_1^* x_1 + y_2^* x_2 + y_3^* x_3 + \cdots + y_n^* x_n \tag{7.19}$$

ということである．

(10) 2 つのエルミート行列 H と K が交換するならば，すなわち，

$$HK = KH \tag{7.20}$$

ならば 1 つのユニタリー変換 U で，H と K を同時に対角化することができる．すなわち，

$$U^\dagger HU = H_D \tag{7.21}$$

$$U^\dagger KU = K_D \tag{7.22}$$

となる．右辺はともに対角行列である．

最後に行列があるパラメーター τ に依存するときのことに触れておく．もし行列の各要素がパラメーター τ に依存しているなら，つまり，

$$U(\tau) = [u_{ij}(\tau)] \tag{7.23}$$

ならば，行列の各行列要素を τ で微分して作った行列を，行列の微分とよぶ．すなわち，

$$\frac{\partial\ U(\tau)}{\partial\ \tau} = \left[\frac{\partial\ u_{ij}(\tau)}{\partial\ \tau}\right] \tag{7.24}$$

である．もし U がユニタリーならば，

$$U^\dagger(\tau)U(\tau) = U(\tau)U^\dagger(\tau) = I \tag{7.25}$$

これを微分すると，

$$i\frac{\partial\ U(\tau)}{\partial\ \tau}U^\dagger(\tau) = -iU(\tau)\frac{\partial\ U^\dagger(\tau)}{\partial\ \tau} \tag{7.26}$$

が得られる．これは左辺の量がエルミートであるということである．そのエルミートな量を $H(\tau)$ とおくと，式 (7.26) から，

$$i\frac{\partial\ U(\tau)}{\partial\ \tau} = H(\tau)U(\tau) \tag{7.27}$$

となる．言い換えると， $H(\tau)$ としてエルミート行列をとっておくと，それがどんなものであっても， $U(\tau)$ が $\tau = \tau_0$ でユニタリーであるかぎり，それ以外のところでもユニタリー性は保たれる．

式 (7.27) は積分形に直し，

$$U(\tau) = U(\tau_0) - i\int_{\tau_0}^{\tau} \mathrm{d}\tau_1 H(\tau_1)U(\tau_1) \tag{7.28}$$

と書くことができる．この式をくり返すと，

$$\begin{aligned} U(\tau) = &\left[I - i\int_{\tau_0}^{\tau} \mathrm{d}\tau_1 H(\tau_1)\right] U(\tau_0) \\ &+(-i)^2\int_{\tau_0}^{\tau} \mathrm{d}\tau_1 \int_{\tau_0}^{\tau_1} \mathrm{d}\tau_2 H(\tau_1)H(\tau_2)U(\tau_2) \end{aligned} \tag{7.29}$$

が得られる． $H(\tau_1)$ と $H(\tau_2)$ とは通常交換しないので，残念ながらこの積分をまとまった形に書くことはできない．そこでよく使う手は，たとえば右辺第 2 項は小さいとして省略し，

$$U(\tau) \approx \left[I - i\int_{\tau_0}^{\tau} \mathrm{d}\tau_1 H(\tau_1)\right] U(\tau_0) \tag{7.30}$$

と近似する．しかしこのときにはユニタリー性が壊れてしまう．ユニタリー性を回復するには式 (7.9) によって，

$$U(\tau) \approx \frac{I - i\int_{\tau_0}^{\tau} \mathrm{d}\tau_1 H(\tau_1)}{I + i\int_{\tau_0}^{\tau} \mathrm{d}\tau_1 H(\tau_1)} U(\tau_0) \tag{7.31}$$

と近似すればよい．

§8. 種々の公式

量子力学や統計力学でしばしば用いられる便利な公式を，以下に 2，3 あげておく．

(1) A や B や $A+\lambda B$ に逆が存在する場合，

$$\frac{1}{A}-\frac{1}{B}=\frac{1}{A}(B-A)\frac{1}{B}=\frac{1}{B}(B-A)\frac{1}{A} \tag{8.1}$$

この式の応用として，

$$\frac{1}{A+\lambda B}=\frac{1}{A}-\frac{1}{A}\lambda B\frac{1}{A+\lambda B} \tag{8.2}$$

$$=\frac{1}{A}-\frac{1}{A}\lambda B\frac{1}{A}+\frac{1}{A}\lambda B\frac{1}{A}\lambda B\frac{1}{A}-\cdots \tag{8.2′}$$

これらの式の証明は簡単であろう．たとえば式 (8.2) を導くには，左から（でも右からでも） $A+\lambda B$ をかけて両辺が等しくなることを確かめればよい．

(2) K をエルミートとすると，

$$e^{-iK}Ae^{iK}=A+[A,\ iK]+\frac{1}{2!}\big[[A,\ iK],\ iK\big]+\cdots \tag{8.3}$$

である．

この式を導くには，

$$A(\lambda)\equiv e^{-i\lambda K}Ae^{i\lambda K} \tag{8.4}$$

と置き， λ で微分すると，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}A(\lambda)\Big|_{\lambda=0}=[A,\ iK] \tag{8.5a}$$

同様に，

$$\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\lambda^n}A(\lambda)\Big|_{\lambda=0}=\Big[\cdots\big[[A,\ \underbrace{iK],\ iK\big],\cdots,iK}_{n}\Big] \tag{8.5b}$$

したがって，テーラー展開により，

$$A(\lambda)=A+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}A(\lambda)\Big|_{\lambda=0}\lambda+\cdots \tag{8.6}$$

この式で $\lambda=1$ とおけばよい．

(3) 同様に

$$e^{-iG(t)}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}e^{iG(t)} = i\dot{G}(t) + \frac{1}{2!}[i\dot{G}(t),\, iG(t)] + \frac{1}{3!}\Big[[i\dot{G}(t),\, iG(t)],\, iG(t)\Big] + \cdots \tag{8.7}$$

ただし,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}G(t) = \dot{G}(t) \tag{8.8}$$

である. $G(t)$ は, その時間微分とは一般に交換しないことに注意.

(4)

$$e^{\lambda(A+B)} = e^{\lambda A}U(\lambda) \tag{8.9}$$

とおくと, $U(\lambda)$ は,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}U(\lambda) = e^{-\lambda A}Be^{\lambda A}U(\lambda) \tag{8.10}$$

を満たさなければならない. この式を積分形に直すと,

$$U(\lambda) = I + \int_0^\lambda \mathrm{d}\mu e^{-\mu A}Be^{\mu A}U(\mu) \tag{8.11}$$

$$= I + \int_0^\lambda \mathrm{d}\mu e^{-\mu A}Be^{\mu A} + \int_0^\lambda \mathrm{d}\mu \int_0^\mu \mathrm{d}\nu e^{-\mu A}Be^{\mu A}e^{-\nu A}Be^{\nu A} + \cdots \tag{8.11$'$}$$

一般の A, B の場合には, これを展開形で求めるしか手がない. しかし,

$$[A,\, B] = C \tag{8.12}$$

が A とも B とも交換するならば, 話は簡単になって,

$$U = e^{\lambda B}e^{-\frac{1}{2}\lambda^2 C} \tag{8.13}$$

となる. したがって,

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}C} \tag{8.14}$$

が得られる. 自分で手を使って試してみられたい.

行列の話はこれくらいにして, 以下, 演習問題をやっていただくことにする.

演習問題 VI

1.

$$A=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \qquad B=\begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}$$

を，AB, BA の順序にかけて両者を比較し，$AB=BA$ の条件を求めよ．ただし，a_{12} と a_{21} はともに 0 でないとして分析せよ．

2.

$$A=\begin{bmatrix} a & b & c \\ 2a & 2b & 2c \\ d & e & f \end{bmatrix}$$

の $\det(A)$ はどうなるか？　一目してわからなければ，定義 (2.11') を用いて直接計算してみよ．

3.

$$a_{1k}\frac{\partial\,\Delta_A}{\partial\ a_{2k}}$$

を 3 行 3 列のときに計算し，式 (2.18) を確かめよ．

4.　2 つの行列 A, B に対し，

$$\det(A)\det(B)=\det(AB)$$

を導いてみよ．

5.　A, B の逆が存在するとき，AB の逆は $B^{-1}A^{-1}$ であることを確認せよ．

6.　任意の行列は常に，対称行列と反対称行列の和の形に書くことができる．そのことを一目瞭然に見せる式は何か？

7.　式 (3.12) で $\boldsymbol{e}=(0,0,1)$ ととり，a_{ij} が第 3 軸のまわりの，角 θ だけの回転になっていることを示せ．

8.　$n\times n$ の直交行列は，$n(n-1)/2$ 個のパラメーターで表現できることを

確かめよ．

9.　2つのユニタリー行列の積はまたユニタリー行列である．証明は？

10.　$\boldsymbol{e}^{-i\boldsymbol{Te}\theta}T_i\boldsymbol{e}^{i\boldsymbol{Te}\theta} = a_{ij}T_j$

を導いてみよ．ただし，$\boldsymbol{e}$ は単位ベクトル，a_{ij} は式 (3.12) で与えられる．

11.　2行2列のユニタリー行列は，式 (7.9) によると，

$$U = \frac{I + i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{I - i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}}$$

の形に書くことができるはずである．これを §6 で求めた標準形 (6.21) に直してみよ．

12.　式 (5.2') の T_3 の特性方程式を解いて特性解を求めよ．

13.　T_3 の固有値問題を解いて，その固有値と前問の答えとを比較してみよ．

14.　T_3 を対角化するユニタリー変換を求め，前問の固有ベクトルと比べてみよ．

15.　あるベクトル $\boldsymbol{x}$ と Pauli 行列 σ とのスカラー積 $\boldsymbol{x\sigma}$ を対角化するユニタリー変換を求めよ．$\boldsymbol{x\sigma}$ の固有値は？

16.　2次元回転の行列

$$A = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

はエルミートではない．

(i)　この行列の特性根を求めよ．

(ii)　この行列を対角化するユニタリー変換を求めよ．

17.　交換しない2つの行列 H と K が，もし1つのユニタリー変換で同時に対角化できたとしたら，何か矛盾が出るだろうか？

18.

$$\det[I + \lambda K] = \exp\left\{\mathrm{Tr}[\ln(I + \lambda K)]\right\}$$

を導け．ただし，

$$\begin{aligned} \ln(I + \lambda K) &= \int_0^\lambda \mathrm{d}\mu (I + \lambda K)^{-1}K \\ &= \lambda K - \frac{1}{2}(\lambda K)^2 + \frac{1}{3}(\lambda K)^3 - \cdots \end{aligned}$$

で行列の対数を定義する．また Tr(A) というのは，行列 A の対角要素を加え合わせることを示す．

19. K_1, K_2 を 2 つのエルミートな行列とする．そのときもし U と U_1 がそれぞれ，

$$U = I + i(K_1 + K_2)U$$
$$U_1 = I + iK_1U_1$$

を満たすなら，

$$U = U_1 + iU_1K_2U$$

の関係が成り立つことを証明せよ．

VII. 角 運 動 量

§1. は じ め に

量子力学においては，角運動量（固有角運動量，軌道角運動量も含めて）の 3 成分 J_i $(i = 1, 2, 3)$ は交換関係

$$[J_i,\ J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k \tag{1.1}$$

を満たすエルミート行列として定義される．ここで i, j, k は 1, 2, 3 をとる添え字で，上の k のようにくり返した添え字に対しては和がとってある．

今までに Pauli スピン行列を 2 で割ったものや，$\boldsymbol{T}$ 行列が式 (1.1) を満たすことはすでにみてきたが，ここでは定義 (1.1) から出発して，この交換関係を満たす行列は一般にどのようなものであるかという問題を調べてみよう．

角運動量は力学変数だから，物理的事情に応じて，たとえば外力が働いているとそれは時間とともに動いていくだろう．その各瞬間瞬間で角運動量の各成分は，定義 (1.1) を満たしていなければならない．つまり式 (1.1) だけからは角運動量は一義的に決まらないはずであることを認識しておく必要がある．このことが式 (1.1) のどこに現れているかというと：

式 (1.1) の両辺にユニタリー変換 U を施してみると，

$$J_i' = U^\dagger J_i U \tag{1.2}$$

もやはり式 (1.1) の交換関係を満たしていることがわかる．このユニタリー変換が時間に依存していると式 (1.2) は運動中の角運動量を表していることになる．この点は後で考えよう（§ 5 参照）．

もう 1 つここで注意しておくことは，交換関係 (1.1) の中にはいろいろな解がごっちゃにはいっているということである（群論的にいうと，式 (1.1) の解は必ずしも既約表現ではないということ）．したがって，式 (1.1) 以外に，もう少し性質を規定しておかないと解を見つけるのはむずかしい．

たとえば，

$$J_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} J_2 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} J_3 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{1.3}$$

も，すぐわかるように式 (1.1) を満たしている．いま式 (1.3) から角運動量の長さの 2 乗をつくってみると，

$$J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = \frac{3}{4}\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{1.4}$$

となることがわかる．この式の右辺は対角形にはなっているが，対角線上に 2 つの異なった数字が並んでいる．量子力学では対角線上の数がその力学量を観測したとき得られる値だから，したがって式 (1.3) という解は，一定の長さの角運動量を表していない（群論的なことばを使うと，式 (1.3) は式 (1.1) の規約表現ではない）．

そこで，式 (1.1) の解答を求める際，角運動量の大きさが一定，つまり，

$$\boldsymbol{J}^2 \equiv J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = j(j+1)I \tag{1.5}$$

という解を探すことにする（群論でいえば既約表現を探す）．ここで，$j(j+1)$ と書いたのは結果を知ってのことで，今のところこんな形に書けるかどうかはわからない．可能な j の値は交換関係 (1.1) と矛盾しないように定める．交換関係 (1.1) を満たすような J_i については，容易に確かめられるように

$$[\boldsymbol{J}^2, J_i] = 0 \qquad (i = 1, 2, 3) \tag{1.6}$$

である（演習問題参照）．そこで，$J_i\,(i=1,2,3)$ を $\boldsymbol{J}^2$ とともに全部対角化できれば問題はないが，交換関係 (1.1) のためにそうはいかない．J_i の内の 1 個しか対角化できない．通常は J_3 を特別扱いにしてこれを対角化する．J_3 を特別扱いするのに抵抗を感じるかもしれないが，これはいわば初期条件を与えると思えばよい．この場合，J_1 と J_2 とは式 (1.1) から出てくる不確定関係のために決まらなくなる（これは，同時に対角化できないということと同義である）．

これから調べようということをまとめると：

<u>式 (1.1) を満たすような角運動量のうち，$\boldsymbol{J}^2$ が式 (1.5) の形をしたものにはどんな行列があるか，そして，式 (1.5) の j はどんな値を取りうるか？</u>

ということになる．

まず，J_3 が対角化されているとして，

$$J_3 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix} \tag{1.7}$$

と書く．ただし，ここでは便宜上すべての実数 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ は，大きさの順序に並べてあるとする．すなわち，

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_n \tag{1.8}$$

また，

$$\boldsymbol{J}^2 = j(j+1) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{1.9}$$

さて，J_3 が式 (1.7) のように与えられたとき，$\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ や j がどんな値をとり，かつ J_1 や J_2 がどのような行列のとき，式 (1.1) が満たされるであろうか？

§2. 交換関係 (1.1) を書き直す

この問題を攻めるためには，定義 (1.1) は数学的にあまり便利ではないので，まずそれを書き直す．まず，

$$J_+ \equiv J_1 + iJ_2 \tag{2.1a}$$

$$J_- \equiv J_1 - iJ_2 \tag{2.1b}$$

という量を導入する．これらは互いにエルミート共役になっている．またこれらは逆に解けて，

$$J_1 = \frac{1}{2}(J_+ + J_-) \tag{2.2a}$$

$$J_2 = \frac{1}{2i}(J_+ - J_-) \tag{2.2b}$$

である．

交換関係 (1.1) から，

$$[J_3,\ J_+] = J_+ \tag{2.3a}$$

$$[J_3,\ J_-] = -J_- \tag{2.3b}$$

$$[J_+,\ J_-] = 2J_3 \tag{2.3c}$$

が得られる．式 (2.3) は式 (1.1) と全く同等である．したがって以後式 (1.1) は忘れてもよい．

式 (2.2) によって，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{J}^2 &= \frac{1}{4}(J_+ + J_-)^2 - \frac{1}{4}(J_+ - J_-)^2 + J_3^2 \\ &= \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_3^2 && (2.4a) \\ &= J_-J_+ + J_3 + J_3^2 && (2.4b) \\ &= J_+J_- - J_3 + J_3^2 && (2.4c) \end{aligned}$$

が得られる．これはあとで j を決めるために使う．

次にトレース (trace) という操作を定義する．それは，行列の対角線上の要素をすべて加え合わせるという操作で，

$$\mathrm{Tr}[A] = \sum_{n=1}^{n} a_{ii} \tag{2.5}$$

と書く．A は任意の行列で，非対角線要素はこの場合無関係である．トレースの重要な性質は，

$$\mathrm{Tr}[AB] = \mathrm{Tr}[BA] \tag{2.6}$$

である．ただしこの等式は有限の行列ではいつでも成り立つが，無限の行列では注意して使わなければならない．

そこで式 (2.3c) の両辺のトレースをとると，

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 + \cdots + \lambda_n = 0 \tag{2.7}$$

が得られる．すなわち，角運動量の第 3 成分を対角化すると，対角要素の和は 0 でなければならない（実は，このことは式 (1.1) によってどの成分にも成り立つことであった）．

§3. λ_i や j の可能な値

λ_i や j を決めるために，式 (2.3a) の行列要素を調べる．i 行 j 列の要素は，

$$(\lambda_i - \lambda_j - 1)(J_+)_{ij} = 0 \tag{3.1}$$

だから，

$$(J_+)_{ij} \neq 0 \tag{3.2a}$$

であるのは，

$$\lambda_i - \lambda_j - 1 = 0 \tag{3.2b}$$

のときに限られる．

$i = j$ なら式 (3.2b) は満たされえないから，式 (3.2a) は成り立たず，

$$(J_+)_{ii} = 0 \qquad (i \text{ について和をとらない}) \tag{3.3}$$

である．つまり J_+ の対角項はすべて 0 である．λ_i は，

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \cdots \geq \lambda_n \tag{3.4}$$

の順序に並べてあるから，$i > j$ なら，

$$\lambda_i \leq \lambda_j \tag{3.5}$$

であって，これは式 (3.2b) を満たすことはできない．したがって $i>j$ の場合は常に，

$$(J_+)_{ij}=0 \qquad (i>j) \tag{3.6}$$

である．特に，

$$(J_+)_{nj}=0 \tag{3.7}$$

である．

J_- の方は J_+ のエルミート共役だから，直ちに，

$$(J_-)_{jn}=0 \tag{3.8}$$

そこで式 (2.4c) の n 行 n 列要素をみると，

$$(\boldsymbol{J}^2)_{nn}=(J_+)_{nj}(J_-)_{jn}-\lambda_n+\lambda_n^2=\lambda_n(\lambda_n-1) \tag{3.9}$$

これは式 (1.5) により，

$$=j(j+1) \tag{3.10}$$

$$\therefore \qquad \lambda_n=-j \tag{3.11}$$

となる．式 (3.11) は，λ_n と $-j$ が等しいということだけで，j がどんな値をとるかはまだわからない．

式 (3.6) や (3.7) を絵に書くと，いまのところ，

$$J_+=\begin{bmatrix} 0 & & ? \\ & 0 & \\ & & \ddots & \\ \text{0} & & & 0 \end{bmatrix} \tag{3.12a}$$

$$J_-=\begin{bmatrix} 0 & & \text{0} \\ & 0 & \\ & & \ddots & \\ ? & & & 0 \end{bmatrix} \tag{3.12b}$$

で，J_+ の右上はまだ決まっていない．それを決める前に，$\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$

を決めよう．

$(J_+)_{ij}$ が 0 でないのは $i < j$ のときで，そのとき式 (3.3b) が満たされるのだから，$i = n-1$，$j = n$ とおくと，

$$\lambda_{n-1} = \lambda_n + 1 \tag{3.13}$$

となる．同様に，

$$\lambda_{n-2} = \lambda_{n-1} + 1 \tag{3.14}$$

$$\vdots$$

したがって，J_+ が 0 でない要素に対して，

$$\lambda_i = \lambda_n + (n-i) \tag{3.15}$$

であることになる．J_3 はしたがって対角線上に右下から，$\lambda_n, \lambda_n+1, \cdots, \lambda_n+n-1$ が並んでいることになる．ところが，これらすべての和が 0 という条件 (2.8) があるから，

$$\mathrm{Tr}[J_3] = \sum_{i=1}^{n}\{\lambda_n + (n-i)\} = n\lambda_n + n^2 - \frac{n(n+1)}{2} = 0 \tag{3.16}$$

$$\therefore \quad j = -\lambda_n = \frac{n-1}{2} \tag{3.17}$$

したがって式 (3.15) により，

$$\therefore \quad \lambda_i = -(j+i) + n = j - i + 1 \tag{3.15$'$}$$

となる．つまり j の可能な値は，

$$j = -\lambda_n = \begin{cases} 0 & n=1 \\ \dfrac{1}{2} & n=2 \\ 1 & n=3 \\ \dfrac{3}{2} & n=4 \\ \cdots\cdots & \end{cases} \tag{3.18}$$

でなければならない．

これまでにわかったことをまとめると：

式 (2.3) の交換関係を満たす行列のなかで，

$$\boldsymbol{J}^2 = j(j+1)I \tag{3.19}$$

$$J_3 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix} \tag{3.20}$$

となるものは，

$$j = -\lambda_n = \frac{n-1}{2} \qquad (n = 1, 2, \cdots) \tag{3.21}$$

のとき存在し，そのとき，

$$J_3 = \begin{bmatrix} j & & & 0 \\ & j-1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & -j \end{bmatrix} \tag{3.22}$$

であり，

$$J_+ = \begin{bmatrix} 0 & & & ? \\ & 0 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 0 \end{bmatrix} \tag{3.23}$$

である．交換関係 (2.3) と (3.19) だけから，式 (3.21)，(3.22)，(3.23) が決まったことに注意．次に，J_+ の残りの部分を決める．

§4. J_+ の 決 定

式 (3.15) によると，

$$\lambda_i - \lambda_j = j - i \tag{4.1}$$

だから，$(J_+)_{ij}$ が 0 でないのは，式 (3.2b) により，

$$j-i=1 \quad \therefore \quad j=i+1 \tag{4.2}$$

のときに限られる．すなわち，

$$J_+ = \begin{bmatrix} 0 & ? & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & ? & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & ? & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & & \cdots & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{4.3}$$

のように，0 でない値がとれるのは，対角線の右隣の要素だけである．それらを，

$$(J_+)_{i-1,i} = a_i \tag{4.4}$$

とおくと，式 (2.4b) の i 行 j 列の要素は，

$$|a_i|^2 = j(j+1) - \lambda_i(\lambda_i+1) \tag{4.5}$$

を与える．これはいつでも 0 より大きい（ λ_i の最大値は j だから）．したがって一般に，

$$(J_+)_{i-1,i} = \sqrt{j(j+1)-\lambda_i(\lambda_i+1)}\,e^{i\phi_i} \tag{4.6}$$

という形になる*．この位相 ϕ_i は決まらない． J_+ に残された自由度はこれしかない．この自由度は，角運動量の運動を論じるとき重要になる． J_3 を式 (1.7) の形に決めると， J_+ と J_- には位相の自由度しか残らないのである．

これでけっきょく，位相以外はすべて決まったことになるが，2 行 2 列では，これがちょうど Pauli 行列を 2 で割ったものの表現（XI 章，式 (6.12)）を与える．また 3 行 3 列では，

$$J_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \; J_2^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix} \; J_3^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{4.7}$$

で，これらは（XI 章，式 (5.2′)）をユニタリー変換したものである．ただし，位相は 0 とおいた．

4 行 4 列では，

---

* 式 (4.6) を，行列要素を指定する i や j で書くことはできるが，式 (4.6) のようにコンパクトな形にはならない．

$$J_1^{(\frac{3}{2})} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \tag{4.8a}$$

$$J_2^{(\frac{3}{2})} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{3} & 0 & 0 \\ i\sqrt{3} & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -i\sqrt{3} \\ 0 & 0 & i\sqrt{3} & 0 \end{bmatrix} \tag{4.8b}$$

$$J_3^{(\frac{3}{2})} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix} \tag{4.8c}$$

である．

式 (3.18) の j を普通，角運動量とよぶ．たとえば，角運動量 1 といったら $j=1$ で，それは 3 行 3 列の行列，角運動量 3/2 といったら，$j=3/2$ で，それは 4 行 4 列の行列である．

最後に注意を 2 つ：

(1) ここでは行列だけを使って $\boldsymbol{J}$ を求めたが，量子力学では固有ベクトルのほうも用いる．次のような記号がしばしば使われる．

$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 の同時固有ベクトルを $|j,m\rangle$ と書く．ここで，m と書いたのは，

$$m = j,\ j-1,\ j-2,\ \cdots,\ -j \tag{4.9}$$

という $2j+1$ 個の値を取る，J_3 の固有値である．したがって，

$$\boldsymbol{J}^2|j,m\rangle = j(j+1)|j,m\rangle \tag{4.10a}$$

$$J_3|j,m\rangle = m|j,m\rangle \tag{4.10b}$$

と書かれる．また式 (4.6) に相当する式は，

$$J_\pm\,|j,m\rangle = \sqrt{(j\mp m)(j\pm m+1)}\,|j,m\pm 1\rangle \tag{4.11}$$

である．

上の固有ベクトル $|j,m\rangle$ は，j を固定したとき $(2j+1)$ 行 1 列の行列で

ある．

(2)　$\boldsymbol{J}^2$ は $j(j+1)$ の値をとり，J_3 の最大値は j であるから，$\boldsymbol{J}$ の長さは J_3 の最大値より大きくなっている．これは量子力学では，J_3 が完全に上（第3軸の方向）を向いていても，J_1 と J_2 のほうは0という確定値をとりえず，したがって $\boldsymbol{J}$ の長さが j より大きくなっているのである．

§5.　角運動量の運動

次に角運動量の運動について簡単に触れておく．粒子が電荷をもっていると，角運動量に比例した磁気能率が生じる．したがって磁場の中の荷電粒子には力が働く．この力による運動がユニタリー変換 $U(t)$ で与えられるとしよう．ユニタリー変換の時間的変化は，VI 章 §7の終わりで注意したが，

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t) = H(t)U(t) \tag{5.1}$$

という形で与えられる．ここで $H(t)$ はエルミートな行列である．この行列を

$$H(t) = g\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{H} \tag{5.2}$$

として，式 (5.1) を解けば，磁場 $\boldsymbol{H}(t)$ の中の $\boldsymbol{J}$ の運動がわかる．ここで g とは，磁場 $\boldsymbol{H}(t)$ と $\boldsymbol{J}$ の相互作用の強さを特長づけるある定数である．

磁場 $\boldsymbol{H}(t)$ は簡単のため，

$$\boldsymbol{H} = (0, 0, H) \tag{5.3}$$

つまり第3軸の方向を向いた静磁場としよう．

式 (5.1) を積分形に直してから，逐次的に解くと，

$$U(t) = I - i\int_0^t \mathrm{d}t_1 H(t_1) + (-i)^2\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2 H(t_1)H(t_2) + \cdots \tag{5.4}$$

となる．ただし，

$$U(0) = I \tag{5.5}$$

とした．またいまは $H(t)$ が時間によらない場合を考えているから，

$$\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_0^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n = \frac{1}{n!}t^n \tag{5.6}$$

である．したがって，

$$U(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-ig)^n}{n!} t^n (J_3 H)^n = e^{-igJ_3Ht} \tag{5.7}$$

となる．これから $\boldsymbol{J}$ の運動は，

$$\boldsymbol{J}'(t) = U^\dagger(t)\boldsymbol{J}U(t) \tag{5.8}$$

で与えられることになる．これを計算するには，式 (2.3a) および VI 章の式 (8.3) を用いればよい．結果は，

$$J'_+(t) = e^{igJ_3Ht} J_+ \tag{5.9a}$$

$$J'_-(t) = e^{-igJ_3Ht} J_- \tag{5.9b}$$

$$J_3(t) = J_3 \tag{5.9c}$$

となるから，結局，

$$J'_1(t) = \cos(gJ_3Ht)J_1 - \sin(gJ_3Ht)J_2 \tag{5.10a}$$

$$J'_2(t) = \sin(gJ_3Ht)J_1 + \cos(gJ_3Ht)J_2 \tag{5.10b}$$

$$J'_3(t) = J'_3 \tag{5.10c}$$

これは，第 3 軸の回りに角速度 gJ_3H で回転しているベクトルの式でもある．磁場の方向の成分 J_3 は変化していない．

式 (5.9) では， gJ_3Ht が J_+ と J_- の位相になっていることに注意してほしい．

§3 で，J_3 を対角形にして J_+ と J_- を求めると，それらの位相以外には完全に決まってしまったことを思い出すと，このことはよく理解できる．外場によって J_3 は変化しないから， $\boldsymbol{J}$ が角運動量であるかぎり，位相の自由しか残っていないのである．

静的な磁場ならば，いつでも磁場の方向を第 3 軸に選ぶと，上の計算があてはまる．時間に依存する磁場の場合は，一般的に式 (5.4) の積分を求めることは不可能で，回転座標をうまく選び，その座標系では，磁場ができるだけ静的であるように工夫しなければならない．このことはノート I で触れたことがある．

§ 6.　角運動量の合成

古典力学では，2つの角運動量 $J_i^{(1)}$ と $J_i^{(2)}$ を合成するという操作は簡単だが，量子力学では交換関係 (1.1) のために，ことはかなり複雑になる．たとえば，

$$J_i = aJ_i^{(1)} + bJ_i^{(2)} \tag{6.1}$$

を考えると，古典力学では任意の数 a, b に対してこれがまた角運動量になる．しかし，量子力学ではそうはいかない．というのは，J_i と $J_i^{(1)}$ と $J_i^{(2)}$ が別個に交換関係 (1.1) を満たさなければならないという制限があるからである．それでは J_i がまた角運動量になるためには，a, b に対してどのような制限が必要か？

$J_i^{(1)}$ と $J_i^{(2)}$ とが別個に関係 (1.1) を満たし，かつお互いに交換するとすると，

$$[J_i, J_j] = a^2[J_i^{(1)}, J_j^{(1)}] + b^2[J_i^{(2)}, J_j^{(2)}] = i\varepsilon_{ijk}\{a^2 J_k^{(1)} + b^2 J_k^{(2)}\} \tag{6.2}$$

そしてこれが，

$$= i\varepsilon_{ijk}\{aJ_k^{(1)} + bJ_k^{(2)}\} \tag{6.2'}$$

に等しくなければならない．したがって，

$$a^2 = a \tag{6.3}$$

$$b^2 = b \tag{6.3$'$}$$

つまり，

$$a = 1 \quad \text{or} \quad 0 \tag{6.4}$$

$$b = 1 \quad \text{or} \quad 0 \tag{6.4$'$}$$

だから，角運動量のたし算としての意味のあるのは，

$$J_i = J_i^{(1)} + J_i^{(2)} \tag{6.5}$$

のときだけであるということになる．

$J_i^{(1)}$ が n 行 n 列（つまり角運動量が $j = (n-1)/2$）であり，$J_i^{(2)}$ が m 行 m 列（$j = (m-1)/2$）のとき，たし算とはいったい何であろうか？

“和”ということの意味を理解するためには，まず2つの行列の**直積**と**直和**という操作を導入しておかなければならない．

いま2つの行列 $A(n\times m)$ と $B(m\times m)$ があったとしよう．A の要素を a_{ij}，B の要素を $b_{\alpha\beta}$ とする．i と j とは1から n まで変わり，α と β とは1から m まで変わる添え字である．このとき，

$$a_{ij}b_{\alpha\beta} \tag{6.6}$$

という $(n\times m)^2$ 個の量を要素とする $(n\times m)$ 行 $(n\times m)$ 列の行列を，

$$A\otimes B \tag{6.7}$$

と書く．これを行列の形に書くのはかえって混乱するかもしれないが，たとえば，

$$A=\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix} \qquad B=\begin{bmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{bmatrix} \tag{6.8}$$

の場合には，

$$A\otimes B=\left[\begin{array}{c:c} \alpha A & \beta A \\ \hdashline \gamma A & \delta A \end{array}\right] \tag{6.9}$$

または，

$$=\left[\begin{array}{c:c:c} aB & bB & cB \\ \hdashline dB & eB & fB \\ \hdashline gB & hB & iB \end{array}\right] \tag{6.10}$$

を意味する．式 (6.9) と (6.10) は異なった行列のように見えるが，第2のほうは第1のほうの行の間で組み替えをやり，列の呼び変えを適当にやっただけで同じものである．どちらか一方の書き方に決めておけばよい．以下混乱しないように，直積は第1のほうで定義すると約束しておく．たとえば，

$$A\otimes I=\left[\begin{array}{c:c:c:c} A & & & \\ \hdashline & A & & \\ \hdashline & & & \\ \hdashline & & & A \end{array}\right] \tag{6.11}$$

$$I \otimes B = \left[\begin{array}{c:c:c:c} b_{11}I & b_{12}I & & \\ \hdashline b_{21}I & b_{22}I & & \\ \hdashline & & & \\ \hdashline & & & b_{mm}I \end{array}\right] \tag{6.12}$$

を意味するとする．

次に 2 つの行列の和を考える．量子力学で簡単に $A+B$ と書いたときには，実は，

$$A \otimes I + I \otimes B \tag{6.13}$$

を意味している（異なった粒子の力学量を加えるなどといったときには式 (6.13) の意味である）．上の 2 行 2 列と 3 行 3 列の例では，

$$A + B = A \otimes I_2 + I_3 \otimes B = \begin{bmatrix} A & 0 \\ 0 & A \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \alpha I_3 & \beta I_3 \\ \gamma I_3 & \delta I_3 \end{bmatrix} \tag{6.14}$$

である．ここで I_2 , I_3 と書いたのは，それぞれ 2×2 , 3×3 の単位行列である．したがって，たとえば，

$$\begin{aligned} \{A+B\}^2 &= \{A \otimes I_2 + I_3 \otimes B\}^2 \\ &= A^2 \otimes I_2 + I_3 \otimes B^2 + 2A \otimes B \end{aligned} \tag{6.15}$$

これを通常， A と B が交換するといって，簡単に，

$$= A^2 + B^2 + 2A \cdot B \tag{6.16}$$

と書くが，それはあくまで式 (6.15) の意味である．

直和というのは， $A \oplus B$ と書き，

$$A \oplus B = \left[\begin{array}{c:c} A & 0 \\ \hdashline 0 & B \end{array}\right]$$

とすることを意味する．

角運動量に話を戻そう．行列の足をちゃんと書くと，式 (6.5) は，

$$(J_k)_{i\alpha, j\beta} = (J_k^{(1)})_{ij}\delta_{\alpha\beta} + \delta_{ij}(J_k^{(2)})_{\alpha\beta} \tag{6.5$'$}$$

ということである．ただし， i, j は 1 から n まで， α, β は 1 から m まで変わる添え字である．いちいち，式 (6.9), $\cdots$,(6.11) のように書くとかえって煩雑だから，実際計算ではそうはしないで，式 (6.5$'$) のままで使う．

まず，角運動量のたし算のアイディアだけを説明し，あとで2個の角運動量を加える計算を具体的に示すことにしよう．

まず，固有ベクトルをはっきり書いて，

$$\boldsymbol{J}^{(1)2}|j_1;m_1\rangle = j_1(j_1+1)|j_1;m_1\rangle \tag{6.17a}$$

$$J_3^{(1)}|j_1;m_2\rangle = m_1|j_1;m_1\rangle \tag{6.17b}$$

$$\boldsymbol{J}^{(2)2}|j_2;m_2\rangle = j_2(j_2+1)|j_2;m_2\rangle \tag{6.18a}$$

$$J_3^{(2)}|j_2;m_2\rangle = m_2|j_2;m2\rangle \tag{6.18b}$$

とする．このとき，固有ベクトル $|j_1;m_1\rangle$ と $|j_2;m_2\rangle$ とは，それぞれ $(2j_1+1)$ 行1列 $(2j_2+1)$ 行1列の行列である．前者は j，後者は β の足をもっているが，それらはあらわに書いてはいない．

合成角運動量 $\boldsymbol{J}$ では，したがって，

$$\begin{aligned} J_3|j_1;m_1\rangle|j_2;m_2\rangle &= J_3^{(1)}|j_1;m_1\rangle|j_2;m_2\rangle + |j_1;m_1\rangle J_3^{(2)}|j_2;m_2\rangle \\ &= (m_1+m_2)|j_1;m_1\rangle|j_2;m_2\rangle \end{aligned} \tag{6.19}$$

であって，固有ベクトルになっているが，$\boldsymbol{J}^2$ の固有ベクトルにはなっていない．なぜなら，式 (6.16) の意味で，

$$\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{J}^{(1)2} + \boldsymbol{J}^{(1)2} + 2\boldsymbol{J}^{(1)}\cdot\boldsymbol{J}^{(2)} \tag{6.20}$$

であり，右辺第3項が対角になっていないからである．

そこで $|j_1,;m_1\rangle$ と $|j_2;m_2\rangle$ の線形結合で，式 (6.20) の固有ベクトルになっているものを探す．

結果をまずいうと：

2個の固有ベクトル $|j_1;m_1\rangle$ と $|j_2;m_2\rangle$ の積は，固有ベクトル $|j_1+j_2;m'\rangle$, $|j_1+j_2-1;m''\rangle$, ……, $||j_1-j_2|;m'''\rangle$ の線形結合で書かれる．この線形結合の係数が，よく知られた Clebsch-Gordan 係数である．

例を挙げると，いま $j_2=1/2$ とするときの線形結合には，

$$\left|j_1+\frac{1}{2};m_+\right\rangle \quad \left|j_1-\frac{1}{2};m_-\right\rangle \tag{6.21}$$

が出てきて，

$$\left|j_1+\frac{1}{2};m_+\right\rangle = \sqrt{\frac{j_1+m_++\frac{1}{2}}{2j_1+1}}\left|j_1;m_+-\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{j_1-m_++\frac{1}{2}}{2j_1+1}}\left|j_1;m_++\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{6.22}$$

$$\left|j_1-\frac{1}{2};m_-\right\rangle=-\sqrt{\frac{j_1-m_-+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}\left|j_1;m_--\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2};\frac{1}{2}\right\rangle$$

$$+\sqrt{\frac{j_1+m_-+\frac{1}{2}}{2j_1+1}}\left|j_1;m_-+\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2};-\frac{1}{2}\right\rangle \tag{6.23}$$

という関係になる．これらは規格化された固有ベクトルである．

一般の場合には，

$$|j;m\rangle=\sum_{m=m_1+m_2}|j_1;m_1\rangle|j_2;m_2\rangle\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j;m\rangle \tag{6.24}$$

と書き，係数

$$\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j;m\rangle \tag{6.25}$$

が Clebsch-Gordan 係数である．この係数が 0 にならないのは，

$$j=j_1+j_2,\ j_1+j_2-1,\ \cdots,\ |j_1-j_2| \tag{6.26a}$$

$$m=j,\ j-1,\ \cdots,\ -j+1,\ -j \tag{6.26b}$$

の場合である．またこれらはユニタリー条件

$$\sum_{m=m_1+m_2}\{\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j;m\rangle\}^*\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j';m'\rangle$$
$$=\delta_{mm'}\delta_{jj'} \tag{6.27a}$$

$$\sum_{j=j_1+j_2,\cdots}\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j;m\rangle\{\langle j_1',j_2';m_1',m_2'|j;m\rangle\}^*$$
$$=\delta_{m_1m_1'}\delta_{m_2m_2'} \tag{6.27b}$$

を満たしている．この係数には詳しい表が与えられているので，実際に計算することはない．

条件 (6.27) を使うと，式 (6.24) を逆に解くことができて，

$$|j_1;m_1\rangle|j_2;m_2\rangle=\sum_{\substack{m=m_1+m_2\\ j=|j_1-j_2|}}^{j_1+j_2}|j;m\rangle\{\langle j_1,j_2;m_1,m_2|j;m\rangle\}^* \tag{6.28}$$

となる．式 (6.28), (6.24) どちらでも便利な方を使えばよい．

Clebsch-Gordan 係数で作られたユニタリー行列が，$\boldsymbol{J}^2$ と J_3 を対角化する．

なお，関係

$$(2j_1+1)(2j_2+1) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) \tag{6.29}$$

に注意されたい．

Clebsch-Gordan 係数に関する性質の一般的証明は，やや煩雑なのでここではやらない．たとえば，“大学演習量子力学（小谷・梅沢編，共立出版）”などに詳しく証明してある．

前に挙げた公式 (6.22), (6.23) を使って，それぞれ $j_1=1$ の場合，$j_1=1/2$ の場合に具体的に，$|3/2\,;m_+\rangle$ と $1/2\,;m\rangle$，および $|1\,;m_+\rangle$ と $|0\,;0\rangle$ に分解してみられるのはよい練習になると思う．

最後に，固有ベクトルを使わずに，純行列を使って実際に $j_1=1/2$ と $j_2=1/2$ を合成してみよう．

まず，

$$\boldsymbol{J} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\otimes I + I\otimes\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{6.30}$$

とすると，式 (6.9) の意味で，

$$J_1 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.31a}$$

$$J_2 = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -i & -i & 0 \\ i & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & -i \\ 0 & i & i & 0 \end{bmatrix} \tag{6.31b}$$

$$J_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.31c}$$

で，全てエルミートである．またこれから，

$$J_1^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.32a}$$

$$J_2^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.32b}$$

$$J_3^2 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.32c}$$

したがって，

$$\boldsymbol{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2 = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{6.33}$$

であって，対角化されていない．これを対角化するために，ユニタリー行列

$$\mathcal{S} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{6.34}$$

を用いると,

$$\mathcal{S}^\dagger \boldsymbol{J}^2 \mathcal{S} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \tag{6.35}$$

となる. 対角形にはなったが, 4 行 4 列目と 3 行 3 列目を交換したいものである. そこでもう一度

$$u = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.36}$$

でユニタリー変換すると,

$$u^\dagger \mathcal{S}^\dagger \boldsymbol{J}^2 \mathcal{S} u = \left[\begin{array}{ccc:c} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right] \tag{6.37}$$

となる. $j = 1$ と $j = 0$ で, うまい具合に既約になっていることが, 一目瞭然になる. 各成分に同じユニタリー変換をすると,

$$u^\dagger \mathcal{S}^\dagger J_1 \mathcal{S} u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{ccc:c} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right] \tag{6.38a}$$

$$u^\dagger \mathcal{S}^\dagger J_2 \mathcal{S} u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\begin{array}{ccc:c} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right] \tag{6.38b}$$

$$u^\dagger \mathcal{S}^\dagger J_3 \mathcal{S} u = \left[\begin{array}{ccc:c} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ \hdashline 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right] \tag{6.38c}$$

となり，右肩の 3 行 3 列の行列は，前に求めた $j=1$ の行列 (4.7) に完全に一致している．

$$\mathcal{S}u = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \dfrac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \dfrac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\dfrac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.39}$$

の行列要素がちょうど式 (6.22), (6.23) で，$j=1/2$ としたときの Clebsch-Gordan の係数に一致していることも気がつかれたであろう．

§7. Schwinger の角運動量の理論

最後に生成・消滅演算子を用いて角運動量を表現する Schwinger の理論を，ごく簡単に紹介しておこう．

§6 でみたように，大きな角運動量はいつでも小さな角運動量の和に分解できる．そこで，一般の角運動量は，$j=1/2$ から作ることができるであろうと予想される．これを具体的に示したのが，Schwinger による角運動量の理論で，第二量子化の理論に慣れた人々にはたいへん便利なものである．たとえば，この理論を用いると，量子力学的角運動量を古典的なそれと結び付けることが可能になる．しかし，この理論は量子的角運動量の性質をよく知っていて，それに合うように作り上げたという面もあって，出発点はやや抽象的である．

生成・消滅演算子については，ノートＩのＶ章で説明したから，まずそれを復習しよう．

交換関係

$$[a,\ a^\dagger] = 1 \tag{7.1}$$

を満たすBose粒子の生成・消滅演算子を考える．すると数の演算子

$$N = a^\dagger a \tag{7.2}$$

はエルミートで，対角化でき，その固有値は，

$$n = 0, 1, 2, \cdots \tag{7.3}$$

である．固有ベクトルを $|n\rangle$ と書くと，

$$N|n\rangle = n|n\rangle \tag{7.4}$$

である．そして規格化直交固有ベクトルは，

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle \tag{7.5}$$

である．ただし，真空状態 $|0\rangle$ は，

$$a|0\rangle = 0 \tag{7.6}$$

を満たすような固有ベクトルで，

$$\langle 0|0\rangle = 1 \tag{7.7}$$

と規格化してある．

角運動量をこのような演算子で表すには，生成・消滅演算子を2種類使う．つまり，

$$[a_1,\ a_1^\dagger] = 1 \tag{7.8a}$$

$$[a_2,\ a_2^\dagger] = 1 \tag{7.8b}$$

$$[a_1,\ a_2] = [a_1,\ a_2^\dagger] = 0 \tag{7.8c}$$

である． a_1 と a_2 とは互いに独立であって，両者は何時でも交換する．

そこで，

$$J_1 = \frac{1}{2}[a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1] \tag{7.9a}$$

$$J_2 = \frac{1}{2i}[a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1] \tag{7.9b}$$

$$J_3 = \frac{1}{2}[a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2] \tag{7.9c}$$

という量を導入し，式 (7.8) を使って計算してみると，これらは角運動量の交換関係

$$[J_i,\ J_j] = i\varepsilon_{ijk}J_k \tag{7.10}$$

を満たしていることがわかる．たとえば，

$$\begin{aligned}
[J_1, J_2] &= \frac{1}{4i}[a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1,\ a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1] \\
&= \frac{1}{4i}\{[a_2^\dagger a_1, a_1^\dagger a_2] - [a_1^\dagger a_2, a_2^\dagger a_1]\} \\
&= \frac{1}{4i}\{a_2^\dagger a_2 - a_1^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2\} \\
&= \frac{i}{2}\{a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2\} = iJ_3
\end{aligned} \tag{7.11}$$

である．

式 (7.9) より，

$$J_+ = J_1 + iJ_2 = a_1^\dagger a_2 \tag{7.12a}$$

$$J_- = J_1 - iJ_2 = a_2^\dagger a_1 \tag{7.12b}$$

を定義すると，式 (2.3) と全く同様な

$$[J_3,\ J_+] = J_+ \tag{7.13a}$$

$$[J_3,\ J_-] = -J_- \tag{7.13b}$$

$$[J_+,\ J_-] = 2J_3 \tag{7.13c}$$

が得られる．

さて $\boldsymbol{J}^2$ はどうか?

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{J}^2 &= \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-j_+) + J_3^2 \\
&= \frac{1}{2}\{a_1^\dagger a_2 a_2^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_1 a_1^\dagger a_2\} + \frac{1}{4}\{a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2\}^2 \\
&= \frac{1}{2}\{a_1^\dagger a_1(a_2^\dagger a_2 + 1) + (a_1^\dagger a_1 + 1)a_2^\dagger a_2\} + \frac{1}{4}\{a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2\}^2 \\
&= \frac{1}{4}(N_1 + N_2)(N_1 + N_2 + 2)
\end{aligned} \tag{7.14}$$

ただし，

$$N_1 = a_1^\dagger a_1 \tag{7.15a}$$

$$N_2 = a_2^\dagger a_2 \tag{7.15b}$$

とした．これらの固有値は，それぞれは，

$$n_1 = 0, 1, 2, 3, \cdots \tag{7.16a}$$

$$n_2 = 0, 1, 2, 3, \cdots \tag{7.16b}$$

で，その固有ベクトルは，

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1!}}\frac{1}{\sqrt{n_2!}}(a_1^\dagger)^{n_1}(a_2^\dagger)^{n_2}|0\rangle \tag{7.17}$$

である．

いま，

$$n_1 + n_2 \equiv 2j \tag{7.18a}$$

$$n_1 - n_2 \equiv 2m \tag{7.18b}$$

とおくと，

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!}}\frac{1}{\sqrt{(j-m)!}}(a_1^\dagger)^{j+m}(a_2^\dagger)^{j-m}|0\rangle \tag{7.19}$$

である．すると，

$$J_3|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{2}(N_1 - N_2)|n_1, n_2\rangle = m|n_1, n_2\rangle \tag{7.20}$$

かつ，式 (7.14) により，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}^2|n_1, n_2\rangle &= \frac{1}{4}(N_1 + N_2)(N_1 + N_2 + 2)|n_1, n_2\rangle \\ &= \frac{1}{4}\cdot 2j(2j+2)|n_1, n_2\rangle = j(j+1)|n_1, n_2\rangle \end{aligned}\tag{7.21}$$

となる．これらは， J_3 と $\boldsymbol{J}^2$ の固有値を与え，それらの固有値は前に求めた角運動量のものと一致している．

このやり方の意味をみるためには，

$$J_1 = \frac{1}{2}(a_1^\dagger\ a_2^\dagger)\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{7.22a}$$

$$J_2 = \frac{1}{2}(a_1^\dagger\ a_2^\dagger)\begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{7.22b}$$

$$J_3 = \frac{1}{2}(a_1^\dagger\ a_2^\dagger)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \tag{7.22c}$$

であることに気がつけばよい． $(a_1^\dagger\ a_2^\dagger)$ と $(a_1\ a_2)$ の間にはさまれているのは，Pauli のスピン行列である．つまり Pauli のスピン 1/2 が，上向きのもの $n_1 = (j+m)$ 個，下向きのもの $n_2 = (j-m)$ 個励起されているのが，第 3 成分が値 m をもった角運動量 j である．

ついでに計算しておくと，

$$J_+|n_1, n_2\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|n_1+1,\ n_2-1\rangle \tag{7.23a}$$

$$J_-|n_1, n_2\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}|n_1-1,\ n_2+1\rangle \tag{7.23b}$$

である．これらも角運動量のよく知られた関係である．

この角運動量表示 (7.9) と，ノート I の V 章で導入したコヒーレント状態の考えを併用すると，角運動量の古典的描像を得るのに便利である．

いま，コヒーレント状態を，

$$U|0\rangle = |\ \rangle \tag{7.24}$$

で導入する．ただし，

$$U \equiv e^{i(f_1 a_1^\dagger + f_1^* a_1)} e^{i(f_2 a_2^\dagger + f_2^* a_2)} \tag{7.25}$$

で， f_1 と f_2 とは勝手な複素数である．このコヒーレント状態に対しては，

$$a_1|\ \rangle = if_1|\ \rangle \tag{7.26a}$$

$$a_2|\ \rangle = if_2|\ \rangle \tag{7.26b}$$

が成り立つ．エルミート共役は，

$$\langle\ |a_1^\dagger = -if_1^*\langle\ | \tag{7.27a}$$

$$\langle\ |a_2^\dagger = -if_2^*\langle\ | \tag{7.27b}$$

したがって，式 (7.9) により，

$$J_1^C \equiv \frac{1}{2}\langle\ |\{a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1\}|\ \rangle = \frac{1}{2}\{f_1^* f_2 + f_2^* f_1\} \tag{7.28a}$$

$$J_2^C \equiv \frac{1}{2i}\langle\ |\{a_2^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_1\}|\ \rangle = \frac{1}{2i}\{f_1^* f_2 - f_2^* f_1\} \tag{7.28b}$$

$$J_3^C \equiv \frac{1}{2}\langle\ |\{a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2\}|\ \rangle = \frac{1}{2}\{|f_1|^2 - |f_2|^2\} \tag{7.28c}$$

そこで，勝手な定数を，

$$f_1 = \sqrt{2j}e^{-\frac{i}{2}\phi}\cos\frac{\theta}{2} \tag{7.29a}$$

$$f_2 = \sqrt{2j}e^{\frac{i}{2}\phi}\sin\frac{\theta}{2} \tag{7.29b}$$

という形に書くと，

$$J_1^C = j\sin\theta\cos\phi \tag{7.30a}$$

$$J_2^C = j\sin\theta\sin\phi \tag{7.30b}$$

$$J_3^C = j\cos\theta \tag{7.30c}$$

となり，これは古典的なベクトルの表示である．この場合 j, θ, ϕ などは全く勝手なものでよい．この f_1 と f_2 とは，実はあるスピノルの成分になっている．

演習問題 VII

1. 定義によると，量子力学では式 (1.1) を満たすものを角運動量とよぶ．すると $-\boldsymbol{J}$ は角運動量ではないことになる．このことを確かめよ．

2. 式 (1.3) が式 (1.1) を満たすことを確かめよ．

3. 関係式 (1.6) を確かめよ．

4. 式 (1.1) から式 (2.3) を導け．

5. また問題 4 の逆，つまり式 (2.3) から式 (1.1) を導いてみよ．

6. 有限行列について，トレースの式 (2.6) を導いてみよ．無限行列ではなぜ，この関係式がこわれる可能性があるのだろうか？

7. 本文を見ずに，式 (2.3) と式 (1.9) から，J_+ および j を決めてみよ．

8. $j=1$ の行列 (4.7) の J_3 と $\boldsymbol{J}^2$ の，規格化された固有ベクトルを求めてみよ．

9. 式 (4.7) と，前の T 行列 (5.2′) を結ぶユニタリー変換を求む．

10. 式 (6.22) を用い，$j_1=1$ の場合の線形結合式を実際に作ってみよ．また，式 (6.23) のほうはどうか？

11. 式 (6.34) がユニタリーであることを確かめよ．また，式 (6.36) も同じくユニタリーであることを確認せよ．

12. 式 (7.25) は，

$$e^{i(f_1 a_1^\dagger + f_2 a_2^\dagger)} e^{i(f_1^* a_1 + f_2^* a_2)} e^{-\frac{1}{2}(|f_1|^2+|f_2|^2)}$$

という形に書くことができる．この式を導け．

13. 式 (7.26) を導け．

14. あるユニタリー行列 S が角運動量の各成分 J_i と交換するとき，S は，J_3 と $\boldsymbol{J}^2$ とともに対角化できる．そのとき，S の対角要素は J_3 の固有値によらないことを証明せよ．

VIII. 散 乱 問 題

§1. は じ め に

ここで数学の問題を少し離れ，物理の問題として，Schrödinger の方程式に従う波が，ある障害物によって散乱される現象を取り扱ってみよう．
前に勉強した Green 関数（ノート I の p.83 参照）を応用してみようというわけである．障害物は座標の原点に固定され，球対称のポテンシアル $V(r)$ で表されるとすると，Schrödinger 方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(\boldsymbol{x}, t) \tag{1.1}$$

である．ここでは，Schrödinger 方程式の量子力学的解釈の問題には触れない．量子力学的解釈は，実は散乱問題から出てきたので，それをまず勉強しよう．ここでは，式 (1.1) は単なる古典的な波の方程式としておく．$\hbar$ とか m とかは単なる数で，前者は角運動量の次元，後者は質量の次元をもった，ある定数である．

まず，方程式 (1.1) に従う波について，物理量をしっかり定義しておかなければならない．そのために，式 (1.1) の複素共役方程式を書くと，

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, t) \tag{1.2}$$

式 (1.1) に $\psi^\dagger$ をかけ，式 (1.2) に ψ をかけてひき算すると，

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{x}, t) + \nabla \cdot \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}, t) = 0 \tag{1.3}$$

という連続方程式が得られる．ただし，

$$\rho(\boldsymbol{x}, t) \equiv \psi^\dagger(\boldsymbol{x}, t)\psi(\boldsymbol{x}, t) \tag{1.4a}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}, t) \equiv \frac{\hbar}{2mi}\{\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, t)\,\nabla\psi(\boldsymbol{x}, t) - \nabla\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, t)\psi(\boldsymbol{x}, t)\} \tag{1.4b}$$

である．連続方程式 (1.3) には，障害物を表すポテンシャルが出てこないことに注意．

連続方程式を物理的に解釈するのはご存じと思うが，$\rho(x, t)\,(> 0)$ は，時刻 t において，点 $\boldsymbol{x}$ における波の密度を表し（次元はこの場合 L^{-3} である），$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}, t)$ のほうは，時刻 t における，点 $\boldsymbol{x}$ での波の流れの密度である．($\boldsymbol{J}$ の次元は，式 (1.3) より $L^{-2}T^{-1}$ となる)．したがって，点 $\boldsymbol{x}$ におけるある面積要素 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})$ を通過する波の流れは，

$$\mathrm{d}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}, t) \tag{1.5}$$

である．物理的な量を計算するとき，これが重要である．たとえば，障害物によってどれだけの波が散乱されるかをみるには，障害物からうんと遠くのほうの，ある面積要素 $\mathrm{d}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{x})$ を通過する波の流れを計算しなければならない．もちろん，散乱波の流れは入射波の流れに依存するから，入射波の方を規格化しておかねばならない．それをちゃんと行なって，どれだけ散乱波が出てくるかを示す量として，通常"散乱断面積"という量が使われる．これを言葉で書くと，

$$\text{散乱断面積} = \frac{(\text{ある面積要素}) \times (\text{散乱波の流れの密度})}{(\text{入射波の流れの密度})} \tag{1.6}$$

ということになるが，これを ψ で表さなければならない．この量はもちろん面積の次元をもっている．さて，ψ のどの部分が散乱波なのであろうか？

正直にいうと，ここにたいへんむずかしい問題が潜んでいるが，この問題にはあまり神経質にならず，まず式 (1.1) を，ノートIで勉強した Green 関数を用いて，積分形に書いてみよう．

§2. 方程式 (1.1) の積分

方程式 (1.1) を積分形に直すために Green 関数を求めよう．Green 関数の求め方は，ノート I の III 章で説明した．まず，

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial\ t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right]G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t')=0 \tag{2.1}$$

の解を求める．それを，

$$G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,0)=\frac{1}{i\hbar}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{2.2}$$

となるように規格化する．すると，

$$\begin{aligned}G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t')&\equiv G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t')\theta(t-t')\\&=\begin{cases}G_0(x-x',\,t-t') & t>t'\\ 0 & t<t'\end{cases}\end{aligned} \tag{2.3}$$

で定義されるのが Green 関数で，それは，

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial\ t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right]G^{(\mathrm{ret})}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t')=\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\delta(t-t') \tag{2.4}$$

を満たす．この Green 関数を使うと，式 (1.1) は，積分形

$$\psi(\boldsymbol{x},\,t)=\psi^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},\,t)+\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}t'G^{(\mathrm{ret})}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t')V(r')\psi(\boldsymbol{x},\,t') \tag{2.5a}$$

$$=\psi^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},\,t)+\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}t'G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t')V(r')\psi(\boldsymbol{x}',\,\boldsymbol{t}') \tag{2.5b}$$

となる．右辺にはまだ ψ がはいっているから，これは式 (1.1) を解いたことにはならない．ここで ψ^{in} とは，

$$\left[i\hbar\frac{\partial}{\partial\ t}+\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right]\psi^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},\,t)=0 \tag{2.6}$$

の解である．式 (2.5b) 右辺第 2 項の寄与は，時間が無限の過去に行くに従い消えていくから，第 1 項は初めからあった波，つまり入射波を表す．このあたりの計算は，ノート I, p.93 の議論と全く同じであることに注意されたい．

ところで，この Green 関数の振る舞いを調べてみよう．

まず，式 (2.2) を満たすような G_0 は，

$$G_0(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t') = \frac{1}{i(2\pi)^3\hbar}\int \mathrm{d}^3\ell \exp\{i\ell\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\}\exp\left\{-i\frac{\hbar}{2m}\ell^2(t-t')\right\} \tag{2.7}$$

であることがすぐわかる．したがって，定義 (2.3) により，

$$\begin{aligned}
G^{(\mathrm{ret})}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t') &= \frac{1}{i(2\pi)^3\hbar}\int \mathrm{d}^3\ell \exp\{i\ell\cdot(x-x')\}\exp\left\{-i\frac{\hbar}{2m}\ell^2(t-t')\right\}\theta(t-t') \\
&= -\frac{1}{i(2\pi)^4\hbar}\int \mathrm{d}^3\ell \exp\{i\ell\cdot(x-x')\}\exp\left\{-i\frac{\hbar}{2m}\ell^2(t-t')\right\} \\
&\quad \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\alpha\frac{\exp\{i\alpha(t-t')\}}{\alpha-i\varepsilon} \\
&= -\frac{1}{(2\pi)^4}\frac{2m}{\hbar^2}\int \mathrm{d}^3\ell\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\frac{\exp\{i\ell\cdot(x-x')\}\exp\{-i\omega(t-t')\}}{\ell^2-\frac{2m}{\hbar}\omega-i\varepsilon}
\end{aligned} \tag{2.8}$$

である．この被積分関数は，$\omega>0$ と $\omega<0$ とで，全く異なった振る舞いをしている．ノート I p.53 の式 (6.17)，(6.18) によると，$\mathrm{d}^3\ell$ の積分は実行できて，$\omega>0$ の成分に対しては，

$$\frac{\exp\left\{i\sqrt{\frac{2m}{\hbar}\omega}\,|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\right\}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{2.9a}$$

つまり，振動しており，$\omega<0$ の，成分に対しては，

$$\frac{\exp\left\{-\sqrt{-\frac{2m}{\hbar}\omega}\,|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\right\}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} \tag{2.9b}$$

で，$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|$ が大きくなるに従って指数的に小さくなる解である．これを湯川型関数とよぶこともある．

係数までちゃんと書くと，

$$\begin{aligned}
G^{(\mathrm{ret})}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t') &= -\frac{2m}{\hbar}\frac{1}{4\pi}\frac{1}{2\pi} \\
&\times\int \mathrm{d}\omega\left[\theta(\omega)\frac{\exp\left\{i\sqrt{\frac{2m}{\hbar}\omega}|x-x'|\right\}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\exp\{-i\omega(t-t')\}\right. \\
&\left. +\theta(-\omega)\frac{\exp\left\{-\sqrt{-\frac{2m}{\hbar}\omega}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\right\}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\exp^{\{-i\omega(t-t')\}}\right]
\end{aligned} \tag{2.10a}$$

$$\equiv G^{(+)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t') + G^{B}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\,t-t') \tag{2.10b}$$

となる．ここで，

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & x > 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases} \tag{2.11}$$

である． $G^{(+)}$ のほうは，外向きに進む波を表し， $\omega > 0$ の Fourier 成分しかもっていない． G^{B} のほうは，遠くで 0 になるような解で， $\omega < 0$ の Fourier 成分しかもっていない．

式 (2.5b) を，この記号を使ってもう一度書くと，

$$\begin{aligned} \psi(\boldsymbol{x}, t) = \psi^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x}, t) & \\ + \int_{-\infty}^{\infty} & \mathrm{d}^3x'\mathrm{d}t' G^{(+)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', t-t')V(r')\psi(\boldsymbol{x}', t') \\ + \int_{-\infty}^{\infty} & \mathrm{d}^3x'\mathrm{d}t' G^{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', t-t')V(r')\psi(\boldsymbol{x}', t') \end{aligned} \tag{2.12}$$

である．右辺第 1 項は入射波，第 2 項は外向きに出て行く波，第 3 項は遠方では消えてしまう束縛された場を表す項である．

したがって，波が障害物のまわりにどのように束縛されているかをみたければ，積分方程式

$$\psi^{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x'\mathrm{d}t' G^{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', t-t')V(r')\psi^{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x}', t') \tag{2.13a}$$

を，条件

$$\psi^{\mathrm{B}}(\boldsymbol{x}, t) \to 0 \qquad |\boldsymbol{x}| \to \infty \tag{2.13b}$$

のもとに解けばよい．この方程式の解はもちろん $V(r)$ によるが，また $\omega\,(<0)$ が特別の値をとるときだけ存在する．これが量子力学における“束縛状態”の問題である．この問題はいまここでは論議しない．

一方，散乱を議論するときには，積分方程式

$$\begin{aligned} \psi^{(+)}(\boldsymbol{x}, t) \;=\; & \psi^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x}, t) \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x'\mathrm{d}t' G^{(+)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}', t-t')V(r')\psi^{(+)}(\boldsymbol{x}', t') \end{aligned} \tag{2.14}$$

を，ある境界条件のもとに解けばよい．それを以下で考えよう．

§3. 散 乱 問 題

通常はまずこの式の時間変数を分離して，時間によらない方程式に直してから取り扱う．話を簡単にするために，入射波は，$-z$ 方向から $+z$ 方向に進む平面波としよう．この波は式 (2.6) を満たさなければならないから，

$$\psi^{\mathrm{in}}(\boldsymbol{x},\, t) = A\exp\{(ikz)\}\exp\{(-i\omega_0 t)\} \tag{3.1}$$

という形をしている．ただし，

$$\hbar\omega_0 \equiv \frac{\hbar^2}{2m}k^2 \tag{3.2}$$

で，k は入射波の波数，ω_0 は入射波の角振動数，また A は入射波の振幅である．$\psi^{(+)}(\boldsymbol{x},\, t)$ のほうもそれに従って，

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{x},\, t) \equiv \psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{x})\exp\{-i(\omega_0 t)\} \tag{3.3}$$

とおき，式 (2.14) に代入すると，$G^{(+)}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}',\, \boldsymbol{t}-\boldsymbol{t}')$ の表現を用い，さらに，

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t' \exp\{i(\omega-\omega_0)t'\} = \delta(\omega-\omega_0) \tag{3.4}$$

に気をつけると，時間因子は両辺に共通なものが出てくるから，それを落すと，

$$\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{x}) = A\exp{(ikz)} - \frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}^3x' \frac{\exp\{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}U(r')\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{x}') \tag{3.5}$$

が得られる．ただし，

$$U(r) \equiv \frac{2m}{\hbar^2}V(r) \tag{3.6}$$

とおいた．式 (3.5) が解くべき積分方程式である．なお式 (3.5) の $\psi^{(+)}(\boldsymbol{x},\, t)$ が，微分方程式

$$[\nabla^2 + k^2]\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{x}) = U(r)\psi_{\boldsymbol{k}}^{(+)}(\boldsymbol{x}) \tag{3.5$'$}$$

を満たすことは明らかだろう．それをみるには，

$$[\nabla^2 + k^2]\frac{\exp\{ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|\}}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|} = -4\pi\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \tag{3.7}$$

に注意すればよい．

式 (3.5) の右辺の漸近形を求めるために，障害物を表すポテンシャルは，有限のレンジのもので，

$$U(r) = 0 \qquad r > a \tag{3.8}$$

としよう．a はだいたい，障害物の存在する範囲である．

いま障害物から遠く離れたところでの波を問題にするために，

$$|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'| = r\left(1 - \frac{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{x}'}{r^2} + \cdots\right) \tag{3.9}$$

と展開し，右辺第二項の振る舞いを調べると，

$$-\frac{1}{4\pi}\frac{\exp(ikr)}{r}\int \mathrm{d}^3x' \exp\{(-ik\,\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}'/r)\}U(r')\psi_k^{(+)}(\boldsymbol{x}') \tag{3.10}$$

となる．ここで $|x| = r \gg a$ を仮定し，余計な項を落とした．$k\boldsymbol{x}/r$ は $\boldsymbol{x}$ 方向に向いた波数ベクトルである．式 (3.5) は，したがってずっと遠方で，

$$\psi_k^{+}(\boldsymbol{x}) \to A\left\{\exp(ikz) + \frac{\exp(ikr)}{r}f(\theta)\right\} \tag{3.11}$$

つまり，z 方向に進む入射平面波と外向き球面波の重ね合わせとして振る舞う．ここで，

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi A}\int \mathrm{d}^3x' \exp(-ik\,\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}'/r)U(r')\psi_k^{(+)}(\boldsymbol{x}') \tag{3.12}$$

であり，θ は，$\boldsymbol{x}$（これが散乱波を観測する点）が z 軸となす角である（図 8.1 参照）．この $f(\theta)$ が複素数であることが，あとで重要になる．散乱波は遠方で，

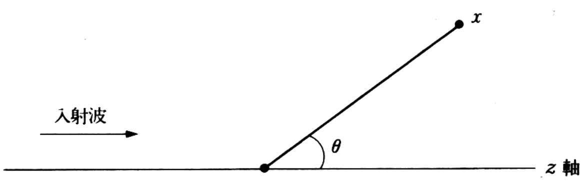


図 8.1

$$\psi^{\mathrm{sc}}(x) = A\frac{\exp(ikr)}{r}f(\theta) \tag{3.13}$$

である．

式 (3.12) の右辺には，正確な式 (3.5) の解 $\psi^{(+)}(x', t)$ がはいっているから，まだ問題を解いたことにはならない．$f(\theta)$ という記号を導入したにすぎない．

しかし以下に見るように，この $f(\theta)$ は散乱断面積 (1.6) に直接結びついて

いる．

それを見るために，障害物から大きな半径 R の球面上で散乱波の流れの密度を計算してみると，式 (3.13) を用い，

$$\begin{aligned} J_R^{\rm sc} &= \frac{\hbar}{2mi}\left\{\psi^{\rm sc\dagger}(\boldsymbol{x})\frac{\partial}{\partial\ r}\psi^{\rm sc}(\boldsymbol{x}) - \frac{\partial}{\partial\ r}\psi^{\rm sc\dagger}(\boldsymbol{x})\cdot\psi^{\rm sc}(\boldsymbol{x})\right\}\Bigg|_{r=R} \\ &= \frac{\hbar k}{m}\frac{|A|^2}{R^2}|f(\theta)|^2 \end{aligned} \tag{3.14}$$

従って，この球面上で，面積要素 $\mathrm{d}S$ を通過する散乱波の流れは，

$$J_R^{\rm sc}\,\mathrm{d}S = \frac{\hbar k}{m}\frac{|A|^2}{R^2}|f(\theta)|^2\,\mathrm{d}S = \frac{\hbar k}{m}|A|^2|f(\theta)|^2\,\mathrm{d}\Omega \tag{3.15}$$

である．ここで $\mathrm{d}\Omega$ は，原点に対して $\mathrm{d}S$ の張る立体角である（$\mathrm{d}S = R^2\mathrm{d}\Omega$ に注意）．

一方，入射波の密度は，

$$\begin{aligned} J^{\rm in} &= \frac{\hbar}{2mi}|A|^2\left\{e^{-ikz}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}e^{ikz} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}e^{-ikz}\cdot e^{ikz}\right\} \\ &= \frac{\hbar k}{2m}|A|^2 \end{aligned} \tag{3.16}$$

したがって，定義 (1.6) により，

$$\mathrm{d}\sigma(\theta) = \frac{J_R^{\rm sc}\mathrm{d}S}{J^{\rm in}} = |f(\theta)|^2\mathrm{d}\Omega \tag{3.17}$$

となる．こうして，計算すべきものは式 (3.12) の $f(\theta)$ である．これはさきほどいったように複素数である．

§4. 収 支 決 算

今までにやってきた計算には，少し考えるとちょっと変なところがある（ということに気がつけばアッパレ!）．式 (3.5) をもう一度じっくり眺めてみよう．

右辺第 2 項は，入射波だが，この波は $z = -\infty$ から $z = +\infty$ の遠方まで広がっている．つまりいま考えている大円の左からはいって，右から出てくるはずである．散乱波の計算をするとき右から出ていく分を考慮しなかった．そこで，もう一度波の収支決算をちゃんと考えてみよう．障害物を中心とする半径 R の大きな円を考え，その表面をどれだけの波が入っていき，どれだけの波が出ていくかを詳しく調べる．波の流れは式 (1.4b) で定義されるか

ら，散乱波と入射波のひっかかった，いわゆる干渉項が利いてくることに気をつけなければならない．

連続の方程式 (1.3) を，大円全体の体積にわたって積分し，Gauss の定理を使って表面積分に直すと，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_V \mathrm{d}^3x\psi^{(+)\dagger}(\boldsymbol{x},t)\psi^{(+)}(\boldsymbol{x},t) = -\int_{\partial V}\mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J} \tag{4.1}$$

となる．障害物が波を吸収しないと（これが実数のポテンシャル $V(r)$ を使った理由．そしてそのとき連続方程式から $V(r)$ が消える），式 (4.1) の右辺は 0 でなければならない．つまり，右辺の表面積分をちゃんと計算すると 0 にならなければならない．

それを確かめるために $\boldsymbol{J}$ を書き出してみると，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{J} &= \frac{\hbar}{2mi}\{(\psi^{\mathrm{in}}+\psi^{\mathrm{sc}})^\dagger\,\nabla(\psi^{\mathrm{in}}+\psi^{\mathrm{sc}}) - \nabla(\psi^{\mathrm{in}}+\psi^{\mathrm{sc}})^\dagger\cdot(\psi^{\mathrm{in}}+\psi^{\mathrm{sc}})\}\\
&= \frac{\hbar}{2mi}\{\psi^{\mathrm{in}\dagger}\,\nabla\psi^{\mathrm{in}} - \nabla\psi^{\mathrm{in}\dagger}\cdot\psi^{\mathrm{in}}\} + \frac{\hbar}{2mi}\{\psi^{\mathrm{sc}\dagger}\,\nabla\psi^{\mathrm{sc}} - \nabla\psi^{\mathrm{sc}\dagger}\cdot\psi^{\mathrm{sc}}\}\\
&\quad + \frac{\hbar}{2mi}\{\psi^{\mathrm{in}\dagger}\,\nabla\psi^{\mathrm{sc}} - \nabla\psi^{\mathrm{in}\dagger}\cdot\psi^{\mathrm{sc}} + \psi^{\mathrm{sc}\dagger}\,\nabla\psi^{\mathrm{in}} - \nabla\psi^{\mathrm{sc}\dagger}\cdot\psi^{\mathrm{in}}\}\\
&\equiv \boldsymbol{J}^{\mathrm{in}} + \boldsymbol{J}^{\mathrm{sc}} + \boldsymbol{J}^{\mathrm{int}}
\end{aligned} \tag{4.2}$$

という 3 項の和からなっている．第 1 項は散乱波の流れ，第 2 項は左から入って右に出ていく入射波の流れ，そして第 3 項が干渉項である．

半径 R が大きいとして，波の漸近形 (3.11) を採用し計算すると，$f(\theta)$ が複素数であるために，干渉項は $\theta=0$ でも消えずに残る．そして結局

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}^{\mathrm{in}} = \frac{\hbar k}{m}[|A|^2 - |A|^2]4\pi R^2 \tag{4.3a}$$

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}^{\mathrm{sc}} = \frac{\hbar k}{m}|A|^2\int \mathrm{d}\Omega|f(\theta)|^2 \tag{4.3b}$$

$$\int \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{J}^{\mathrm{int}} = 2\pi\frac{\hbar}{m}i|A|^2\{f(0)-f^*(0)\} = -4\pi\frac{\hbar}{m}|A|^2\mathrm{Im}f(0) \tag{4.3c}$$

が得られるが，収支決算はこれらを全部加えたものが 0，つまり

$$\frac{k}{4\pi}\int \mathrm{d}\Omega|f(\theta)|^2 = \mathrm{Im}f(0) \tag{4.4}$$

である．この関係は，保存則と漸近形だけからでてきたものである．左辺が散乱の全断面積，右辺が $\theta=0$ の方向（これを前方という）への波の減り具

合である．この減りは波の干渉によっている．

式 (4.4) の関係を言葉で述べると:

前方に進む入射波の減り具合は散乱の全断面積に等しい

と言うことになる．式 (4.4) の関係を**光学定理** (optical theorem) という．この関係では，波の干渉が重要な役割をしていることをもう一度強調しておく．自分で式 (4.3) を直接計算して，この点をよく納得しておかれることをおすすめする．

§5. 光学定理を満たすパラメーター

光学定理 (4.4) を満たすようなパラメーターを導入しよう．式 (4.4) を自動的に満たすようなパラメーターを使うと，いちいち式 (4.4) を気にする必要がなくなるばかりでなく，あとでみるように，散乱データの解析にも便利である．

その目的のためには，Legendre 関数を利用して，角変数を分離する．Legendre 関数は，

$$P_\ell(x) \equiv \frac{1}{2^\ell \ell!}\frac{\mathrm{d}^\ell}{\mathrm{d}x^\ell}(x^2-1)^\ell \qquad \ell = 0, 1, 2, \cdots \tag{5.1}$$

で定義され，規格化直交条件は，

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin\theta P_\ell(\cos\theta)P_{\ell'}(\cos\theta) = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell\ell'} \tag{5.2}$$

である．また，

$$P_\ell(x) = (-1)^\ell P_\ell(-x) \tag{5.3}$$

もときどき必要となる．

この関数を用いて $f(\theta)$ を展開すると，

$$f(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty}\frac{2\ell+1}{2ik}\{S_\ell(k)-1\}P_\ell(\cos\theta) \tag{5.4}$$

展開係数をこのように書いたのは，結果を知ってのことで，こうしておくと便利なのである． $S_\ell(k)$ は複素数である．

光学定理 (4.4) が成り立つためには， $S_\ell(k)$ がどのような条件を満たして

いればよいだろうか？そのために Legendre 関数の性質

$$P_\ell(0) = 1 \tag{5.5}$$

を使って $f(0)$ を計算すると，

$$f(0) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2ik}\{S_\ell(k) - 1\} \tag{5.6a}$$

$$f^*(0) = -\sum_{\ell-0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2ik}\{S_\ell^*(k) - 1\} \tag{5.6b}$$

また，規格化直交条件 (5.2) のおかげで式 (4.4) の左辺の角積分は実行できて，

$$\int \mathrm{d}\Omega |f(\theta)|^2 = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+1)^2}{(2k)^2} |S_\ell(k) - 1|^2 \cdot \frac{4\pi}{2\ell+1} \tag{5.7}$$

これらを式 (4.4) に代入すると，

$$|S_\ell(k)^2| = 1 \tag{5.8}$$

が得られる．したがって， $S_\ell(k)$ を，ある実数 $\delta_\ell(k)$ を使って，

$$S_\ell(k) \equiv \exp\{2i\delta_\ell(k)\} \tag{5.9}$$

と書いておくと，光学定理はもう忘れてもよいことになる（式 (5.9) の指数の肩に 2 を付けたのも，結果の便利のためである）．

式 (5.4) に戻ると，

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2ik}[\exp\{2i\delta_\ell(k)\} - 1]P_\ell(\cos\theta) \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{k} \exp\{i\delta_\ell(k)\} \sin\delta_\ell(k) P_\ell(\cos\theta) \end{aligned} \tag{5.10}$$

となる．

散乱波は式 (3.11) によって，これに e^{ikr}/r をかけたものだから，指数は全体として $\exp\{i(kr + \delta_\ell(k)\}$ となり， $\delta_\ell(k)$ が散乱波の位相のずれを表していることがわかる．この点は次節で詳しく考える．この位相のずれのために，散乱波は入射波と干渉したのであった．

なお，全断面積は $\delta_\ell(k)$ で書くことができ，

$$\sigma^{\text{total}} \equiv \int \mathrm{d}\Omega |f(\theta)|^2 = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2\delta_\ell(k) \tag{5.11}$$

となる．これは式 (5.7) に式 (5.9) を代入しただけである．微分断面積のほうは直交条件が使えないのでこんなに簡単にはならない．

いままでのところ，$\delta_\ell(k)$ は，光学定理を満たすためのパラメーターでしかない．しかし，理論屋として散乱問題を扱うときには，与えられたポテンシャルからこれが計算できなければならない．それをどうやってやるか？

$f(\theta)$ は式 (3.12) で与えられているから，式 (5.9) を Legendre 関数の規格化直交条件を使って逆変換すればよいようにみえる．原理的にはもちろんそれでよい．しかし，そうすると，

$$\int_0^\pi d\theta \sin\theta f(\theta) P_\ell(\cos\theta) = \frac{2}{k}\exp\{i\delta_\ell(k)\}\sin\delta_\ell(k) \tag{5.12}$$

が得られるから，この式の左辺に式 (3.12) を入れて整理すればよいわけだが，これが意外にやっかいなのである．通常は，次節で述べるような，別の手で計算する．

§6. 部分波分解

方程式 (3.5′) を球面極座標で書くために，

$$x = r\sin\theta\cos\phi \tag{6.1a}$$

$$y = r\sin\theta\sin\phi \tag{6.1b}$$

$$z = r\cos\theta \tag{6.1c}$$

によって，座標 r, θ, ϕ を導入する．すると，

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{6.2}$$

である．一方 Legendre 関数は，微分方程式

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \ell(\ell+1)\right]P_\ell(\cos\theta) = 0 \tag{6.3}$$

を満たす．

球対称のポテンシャルの散乱問題では，波動関数 $\psi(\boldsymbol{x})$ は角 ϕ によらないから，

$$\psi_k^{(+)}(\boldsymbol{x}) \equiv \frac{\chi_\ell(k, r)}{r} P_\ell(\cos\theta) \tag{6.4}$$

とおくと，式 (3.5′) は簡単に，

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\chi_\ell(k, r) = U(r)\chi_\ell(k, r) \tag{6.5}$$

となる．この左辺の $\ell(\ell+1)/r^2$ というのは角運動量 ℓ の遠心力の項である．この方程式 (6.5) を，ある境界条件のもとに解くことを考える．そのためには，まずポテンシャルの性質をある程度制限しておかなければならない．特に $r=0$ の点で，$U(r)$ は遠心力より強くは発散しないで，かつそれ以外の点では有限であるとする．つまり，

$$\lim_{r\to 0} \frac{U(r)}{\dfrac{\ell(\ell+1)}{r^2}} = 0 \tag{6.6}$$

が満たされているとする．

式 (6.5) を，

$$\frac{\dfrac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}\chi_\ell(k, r)}{\chi_\ell(k, r)} = \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + U(r) - k^2 \tag{6.7}$$

と書くと，$r=0$ の近くでは右辺第 1 項だけが問題になるから，

$$\chi_\ell(k, r) \approx r^{-\alpha} \tag{6.8}$$

とおいてみると，左辺と右辺が等しくなるのは，

$$\alpha(\alpha+1) = \ell(\ell+1) \tag{6.9}$$

のとき，すなわち，

$$\alpha = \ell \quad \text{または} \quad -(\ell+1) \tag{6.10}$$

のときである．したがって，

$$\chi_\ell(k, r) \approx r^{-\ell} \tag{6.11}$$

$$\chi_\ell(k, r) \approx r^{\ell+1} \tag{6.12}$$

である．しかし，ℓ は正だから，式 (6.11) のほうは式 (6.4) により $\psi(x)$ が原点で発散してしまう．したがって，式 (6.5) の解としては，式 (6.12) のほうを採用しなければならない．

Bessel 関数の理論によると（Bessel 関数に関しては良書が山ほどある．しかしここでは Bessel 関数の詳しい知識は必要ではない．気にしないでさきに進むように），式 (6.5) の右辺を 0 とおいた微分方程式は，2 種類の独立な解

をもち，

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\{krj_\ell(kr)\}=0 \tag{6.13}$$

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]\{krn_\ell(kr)\}=0 \tag{6.14}$$

で，これらの解はそれぞれ漸近形

$$\mathcal{S}_\ell(kr)\equiv krj_\ell(kr)\to\begin{cases}\sin(kr-\frac{1}{2}\ell\pi) & kr\gg\ell \quad (6.15\mathrm{a})\\ \dfrac{(kr)^{\ell+1}}{(2\ell+1)!!} & kr\ll\ell \quad (6.15\mathrm{b})\end{cases}$$

$$\mathcal{C}_\ell(kr)\equiv-krn_\ell(kr)=\begin{cases}\cos\left(kr-\frac{1}{2}\ell\pi\right) & kr\gg\ell \quad (6.16\mathrm{a})\\ \dfrac{(2\ell+1)!!}{(kr)^\ell}\ell & kr\ll\ell \quad (6.16\mathrm{b})\end{cases}$$

をもつ．

Green 関数を求めるために式 (6.13) に $\mathcal{C}_\ell(kr)$ をかけ，式 (6.14) に $\mathcal{S}_\ell(kr)$ をかけてたし算すると（式 (6.16) の $\mathcal{C}_\ell$ の定義における符号のとり方に注意），

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathcal{S}_\ell(kr)\cdot\mathcal{C}_\ell(kr)-\mathcal{S}_\ell(kr)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathcal{C}_\ell(kr)\right\}=0 \tag{6.17}$$

が得られるから，{ } の中は r に無関係である．したがって，これには漸近形 (6.15a) および (6.16a) を用いることにより計算できて，

$$\left\{\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathcal{S}_\ell(kr)\cdot\mathcal{C}_\ell(kr)-\mathcal{S}_\ell(kr)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\mathcal{C}_\ell(kr)\right\}=k \tag{6.18}$$

が得られる．この関係により Green 関数は，

$$G_\ell^{(+)}(r,r')\equiv-\frac{1}{k}\{\mathcal{C}_\ell(kr)\mathcal{S}_\ell(kr')\theta(r-r')+\mathcal{S}_\ell(kr)\mathcal{C}_\ell(kr')\theta(r'-r)\} \tag{6.19}$$

となる．そして，容易に確かめられるように，この関数は，

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+k^2-\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right]G_\ell^{(+)}(r,r')=\delta(r-r') \tag{6.20}$$

を満たす（演習問題参照）．

そうすると，原点の振る舞い (6.12) を考慮して，積分形

$$\chi_\ell(k,r)=a_\ell\mathcal{S}_\ell(kr)+\int_0^\infty\mathrm{d}r'G_\ell^{(+)}(r,r')U(r')\chi_\ell(k,r') \tag{6.21}$$

になる．ただし，ここで a_ℓ というのは任意の定数で，これはあとで便利なように選ぶ．

そこで右辺の漸近形を求めると，

$$\chi_\ell(k,\, r) = a_\ell \mathcal{S}_\ell(kr) - \frac{1}{k}\mathcal{C}_\ell(kr)\int_0^\infty \mathrm{d}r' \mathcal{S}_\ell(kr')U(r')\chi_\ell(k,\, r') \quad (6.22)$$

となる．ここでポテンシャルが有限のレンジをもっていることを使った．

少々前に戻り，$\psi(x)$ の漸近形を求めると，Rayleigh の展開式

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{(2\ell+1)}{kr}(i)^\ell \mathcal{S}_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta) \quad (6.23)$$

により（これも証明は省略するが，適当な本を参照されたい），

$$\begin{aligned}
\psi_k^{(+)}(\boldsymbol{x}) &\to A\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{kr}(i)^\ell \mathcal{S}_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta) \\
&\quad + A\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{2ikr}(i)^\ell \exp\left\{i\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi\right)\right\}[\exp\{2i_\ell(k)\} - 1]P_\ell(\cos\theta) \\
&= A\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{kr}(i)^\ell \exp\{i\delta_\ell(k)\}\left[\sin\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi\right)\cos\delta_\ell(k)\right. \\
&\quad \left. + \cos\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi\right)\sin\delta_\ell(k)\right]P_\ell(\cos\theta) \qquad (6.24) \\
&= A\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{kr}(i)^\ell \exp\{i\delta_\ell(k)\}\cos\delta_\ell(k)\left[\sin\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi\right)\right. \\
&\quad \left. + \cos\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi\right)\tan\delta_\ell(k)\right]P_\ell(\cos\theta) \qquad (6.24')
\end{aligned}$$

となる．式 (6.24) はまた，

$$= A\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{2\ell+1}{kr}(i)^\ell \exp\left\{i\delta_\ell(k)\right\}\sin(kr + \frac{1}{2}\ell\pi + \delta_\ell(k))P_\ell(\cos\theta) \quad (6.24'')$$

とも書くことができることに注意しよう．

ところで式 (6.24′) の [ ] の前の因子は定数にすぎないから，$\psi(x)$ は本質的に

$$\sin\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi\right) + \cos\left(kr - \frac{1}{2}\ell\pi\right)\tan\delta_\ell(k) \quad (6.25)$$

のように振る舞う．これを式 (6.22) と比較すると，

$$a_\ell = 1 \quad (6.26a)$$

$$\tan\delta_\ell(k) = -\frac{1}{k}\int_0^\infty \mathrm{d}r' \mathcal{S}_\ell(kr')U(r')\chi_\ell(k,\, r') \quad (6.26b)$$

となる．

話がたいへんむずかしくなってきたので，このあたりでいったんまとめておくと:

$a_\ell = 1$ とおいたときの積分方程式

$$\chi_\ell(k, r) = \mathcal{S}_\ell(kr) + \int_0^\infty \mathrm{d}r' G_\ell^{(+)}(r, r') U(r') \chi_\ell(k, r') \tag{6.27}$$

を解き，その解を使うと，散乱波の位相は,

$$\tan \delta_\ell(k) = -\frac{1}{k} \int_0^\infty \mathrm{d}r' \mathcal{S}_\ell(kr') U(r') \chi_\ell(k, r') \tag{6.28}$$

で与えられる.

たとえばポテンシャルの影響が小さいときには，式 (6.27) を,

$$\chi_\ell(k, r) \cong \mathcal{S}_\ell(kr) \tag{6.29}$$

で近似すると,

$$\tan \delta_\ell(k) = -\frac{1}{k} \int_0^\infty \mathrm{d}r' \mathcal{S}_\ell^2(kr') U(r') \tag{6.30}$$

となる．これを Born 近似という．さらに位相が小さいと考えられるときには,

$$\tan \delta_\ell(k) \approx \delta_\ell(k) = -\frac{1}{k} \int_0^\infty \mathrm{d}r' \mathcal{S}_\ell^2(kr') U(r') \tag{6.31}$$

である.

この節の議論は，角運動量に関する部分波に分解するやり方で，これは実は量子力学で，球対称のポテンシャルによる散乱を取り扱うときの常套手段であった．このとき角運動量は保存するから，入射波散乱波は角運動量の固有関数で展開して話をしても各角運動量の波が混じってしまうことがないということを利用したのである．厳密な式ではあるが， $\tan \delta_\ell$ を決める式 (6.26b) は，あまり使いやすいものではない．特に χ として式 (6.27) を満たすように決めなければならない．しかし $\tan \delta_\ell$ を求めるためには，いろいろな近似法が考えられている．近似は一般に，目をつけている物理系の特性を利用することが多いから，一般論はここではやれない．あとで変分法に関連してもう一度この問題に戻る.

部分波分解して，散乱を位相という量だけで記述することが可能であった理由を，もう一度考えてみよう．入射波と散乱波のバランスを考慮すると，散乱は実数のパラメーターで記述することができる．この実数のパラメーター

は何を表しているかというと，それは散乱波の位相であった．このことは，考えてみれば，実はこの節の議論を待つまでもなく，すでに§5で明らかであったはずである．われわれは，振動数と波長の決まった波を考えているわけだから（つまり ω と k とは決まっている），波としての自由度は，振幅と位相しかない．ところが，吸収がないという仮定のもとには，入射波と散乱波の振幅の2乗は等しくなければならない．振幅を抑えると，あとに残る自由度は位相しかない．こうして，ω と k が与えられたときの散乱問題では，実数の位相 $\delta_\ell(k)$ だけが出てくることになったわけである．

次の問題は，もし $\delta_\ell(k)$ が観測によってすべてわかったとして，それを与えるようなポテンシャル $V(r)$ が再構成できるかという，**逆散乱問題** (inverse scattering problem) である．最近，逆散乱問題は種々の応用に関連してたいへん重要になってきた．がしかし，この議論を展開するためには，この節に述べた議論だけではまだ準備がたりない．式 (2.14) を書いたとき捨ててしまった $\omega < 0$ の解も必要になる．ここでは，それが原理的に可能であるということだけを注意しておく．

演習問題 VIII

1. 式 (1.1), (1.2) から，実数のポテンシャルの場合，連続の方程式 (1.3) を導け．

2.
$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\alpha \frac{\exp\{i\alpha(t-t')\}}{\alpha - i\varepsilon} \exp\left\{\frac{-i\hbar}{2m}\ell^2(t-t')\right\} = \frac{2m}{\hbar}\int_{\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \frac{\exp\{-i\omega(t-t')\}}{\ell^2 - \dfrac{2m}{\hbar}\omega - i\varepsilon}$$
を導け．

3. 時間に依存する $\psi(x, t)$ の方程式から時間を消去し式 (3.5) を導け．

4. $|\boldsymbol{x}|$ が $|\boldsymbol{x}'|$ に比べてはるかに大きいとき，

$$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'| = r\left\{1-\frac{\boldsymbol{x}\cdot\boldsymbol{x}'}{2}+\cdots\right\}$$

を導け.

5.　式 (4.3) に至る計算をチェックしてみよ．R は大きいとする.

6.　式 (5.6) と (5.7) から式 (5.8) を導け.

7.　微分断面積

$$\mathrm{d}\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 d\Omega$$

を，式 (5.10) を用いて位相を表現してみよ.

8.　式 (5.12) を左辺が決まったとしたら，$\sin^2\delta_\ell$ はどのように表現できるか？

9.　式 (3.5′) を式 (6.5) に変換せよ.

10.　Green 関数 (6.19) が (6.20) を満たすことを確かめよ.

11.　Born 近似の式 (6.30) を用いて，

$$V(r) = ge^{-\kappa r} \qquad \kappa > 0$$

の場合の $\tan\delta_0$ を求めてみよ．ただし，$j_0(x) = \sin x/x$.

12.　もし $U(r) < 0$ （引力）なら $\delta_\ell > 0$ ，$U(r) > 0$ なら $\delta_\ell < 0$ であることを Born 近似で確認し，その物理的意味を考えてみよ.

13.　式 (6.22) をみると，

$$a_\ell = \cos\delta_\ell(k)$$

ととり，

$$\sin\delta_\ell = -\frac{1}{k}\int_0^\infty \mathrm{d}r'\mathcal{S}_\ell(kr')U(r')\chi_\ell(k, r')$$

としてもよいことがわかるが，これは結局式 (6.26b) と同じものである．このことを確認せよ.

IX. 調和振動子と粒子像

§1. はじめに

古典力学に調和振動子というものが出てくる．その特徴は，振幅が振動数に無関係だということである．Galilei が教会の天井からつるされたランプの揺れるのを見て，振子の周期が振幅によらず一定であることを発見したというお話しは，あまりにも有名である．

調和振動子では，Hooke の法則が基礎になる．つまり，粒子に働く力が，粒子の変位に比例し，変位の反対方向を向くとき，調和振動が起きる．そのときのポテンシャルを絵にかくと，図 9.1 のようになる．粒子はポテンシャルの谷の間を一定の周期で右往左往する．

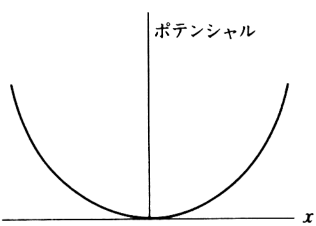


図 9.1

Hookeの話が出たついでにちょっと触れておくと，彼はNewtonと同時代の人で，主に実験をやっていた物理学者である．しかし幅が広く，顕微鏡で動植物の多彩な観測をしたり，光の波動説を唱えたり，弾性体の研究をしたり，重力問題と光の本質については，Newtonと大衝突をしたようである．光の波動説を唱えたHookeが，よく知られたHookeの法則を発見し，しかも20世紀には，Hookeの法則に基づく調和振動子が光量子説の支えになっていることを知ったら，さぞ驚嘆することであろう．科学は予期しない方向に進むものである．

とにかく，この節では光量子説をはじめとして，現代の素粒子論，物性論における素励起の理論の基礎にある調和振動子について考えてみよう．あとでわかるように，Maxwellの方程式に従う電磁場ですら，電波となって遠くへ伝わっていく成分は，調和振動子に分解できる．調和振動子は，前にもいったように，振幅と振動数が互いに独立な系である．非常に荒っぽくいうと，粒子性のほうを振幅で解釈し，波動性のほうを振動数で理解しようというのが現代の考え方である．振幅と振動数は全く独立だから，波動と粒子という矛盾したものを，1個の振動子におしつけることができるわけである．たとえば電磁場の振幅が大きいほど多くの光量子を含む．そしてこの考え方は，一般の場の系に持ち込まれて，場の量子論ができあがった．湯川先生の中間子も調和振動子の一種であるといえる．

しかし，すべての場がいつでも調和振動子の集まりになるわけではない．調和振動子に帰せられるのは，いわゆる双曲線型の微分方程式を満たすような場に限られる．場の量子論では，主としてこのような場を考えるが，場の量子化という概念はもっと広く，調和振動子に帰せられないような場合も含む．このうち，粒子像が描けるのは調和振動子になる場合に限られる．その理由はこの節の議論から明らかになるはずである．粒子とはわれわれが知っているように，1個，2個，…と勘定ができるもののことをいう．

いまのところ，粒子は2種類に大別される．1つは，Bose統計に従うもの，もう1つはFermi統計に従うものである．この区別も調和振動子で理解でき

る．Bose 統計に従う粒子のほうは，振幅がいくらでも大きくなれる調和振動子，また Fermi 統計に従う粒子のほうは，振幅に強い制限があってあまり大きくなれない調和振動子である．以下，場を調和振動子に分解するやり方を中心に，ゆっくりと勉強していこう．

§2. 古典論の調和振動子

質量 m の粒子が Hooke の法則に従う力を受けると，運動方程式

$$m\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2} = -\kappa x = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{1}{2}\kappa x^2\right) \tag{2.1}$$

に従って運動する．ここで κ は正の定数である．

この方程式はすぐ解けて，解は一般に，

$$x(\ t\ ) = A\sin\{\omega t + \delta\} \tag{2.2}$$

となる．ここで，

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{\kappa}{m}} \tag{2.3}$$

であり，積分定数 A と δ とは，与えられた初期条件で決まる．はじめの位置を x_0，初速度を v_0 とすると，振幅は，

$$A = \sqrt{x_0^2 + \frac{v_0^2}{\omega^2}} \tag{2.3a}$$

位相は，

$$\delta = \tan^{-1}\frac{\omega x_0}{v_0} \tag{2.3b}$$

である．

振動子のエネルギーは，

$$\begin{aligned} E &= \tfrac{1}{2}m\dot{x}^2 + \tfrac{1}{2}\kappa x^2 \\ &= \kappa A^2 \end{aligned} \tag{2.4}$$

となり，いうまでもなく時間によらない．

式 (2.1) に戻り，時間に関する微分を 1 階に下げるために，

$$m\dot{x} = p \tag{2.5a}$$

という新しい変数を導入しよう（文字の上の点は時間微分を表す．以後この

記号はたびたび用いられる）．すると式 (2.1) は，

$$\dot{p} = -\kappa x \tag{2.5b}$$

となる．式 (2.5a) と (2.5b) をいっしょにすると式 (2.1) と同じである．1個の変数 x のかわりに，2個の変数 x と p を用いたために，時間微分が1階に下がった．量子力学へいくときには，このほうが便利なのである．以下調和振動子といったら，式 (2.5) の2つの式を意味すると了解されたい．

簡単のため，以下 $m = 1$ とし，また $\kappa = \omega^2$ と書くことにする．すると，運動方程式 (2.5) は，

$$\dot{x} = p \tag{2.6a}$$

$$\dot{p} = -\omega^2 x \tag{2.6b}$$

となる．Hamiltonian として，

$$H = \frac{1}{2}\{p^2 + \omega^2 x^2\} \tag{2.7}$$

をとると，正準方程式として式 (2.6) が得られる．

x と p で張られる位相空間では，調和振動子は，原点を中心とする楕円上を周期的に運動する．楕円の大きさは，振動子のもつエネルギーによる．また円からのずれは ω による．エネルギー E のときの楕円の面積を求めると，

$$S = 2\pi \frac{E}{\omega} \tag{2.8}$$

となる．古典論ではこの面積，同じことだが振動子のもつエネルギー E は全く勝手で，0から無限大までの任意の値をとりうる．

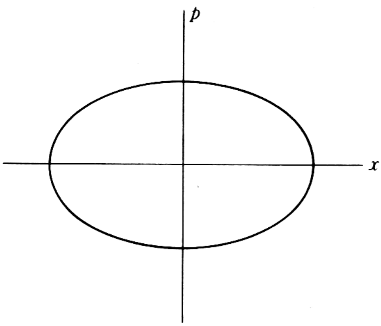


図 9.2

§3. 量子論における調和振動子

調和振動子を量子論的に扱うと，エネルギー E は勝手な値は取れなくて，

$$E = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) \tag{3.1}$$

の値だけが許される．ここで $\hbar$ は，角運動量の次元をもった定数である．このエネルギースペクトルは，量子力学の基礎原理から出てくる．その基礎原理というのは，Hamiltonian として式 (2.7) と同型の

$$H = \frac{1}{2}\{p^2 + \omega^2 x^2\} \tag{3.2}$$

ととるまでは同じだが，量子論では x や p として，単なる数ではなく，

$$xp - px \equiv [\,x,\ p\,] = i\hbar \boldsymbol{I} \tag{3.3}$$

を満たすような行列と考えて問題を解かねばならない．

まず，x と p が有限の行列だと式 (3.3) は満たされないことは明らかであろう．それをみるには，VII 章の式 (2.5) で定義した，トレースに対して有限行列で成り立つ関係 (2.6) を思い出せばよい．もし x と p が有限行列だとすると，式 (3.3) の左辺のトレースは 0 である．一方右辺は単位行列だから，そのトレースは 0 にはなりえない．したがって，式 (3.3) の関係は無限の行列でしか満たされない（上の議論は，x と p が有限ではありえないことをいっているだけで，無限であるという主張ではない．実際に式 (3.3) を満たす無限の表示の存在を確認するまでは安心できない）．その行列表示についてはあとで考えるが，まず行列 (3.2) の固有値が式 (3.1) で与えられることを示そう．

そのためには，ノート I の V 章で導入した，生成・消滅演算子

$$a = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}\left\{x + \frac{i}{\omega}p\right\} \tag{3.4a}$$

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}\left\{x - \frac{i}{\omega}p\right\} \tag{3.4b}$$

を使うのが早道である．事実式 (3.3) によると，

$$[\,a,\ a^\dagger] = \frac{1}{2\hbar}\{-i[\,x,\ p\,] + i[\,p,\ x\,]\} = \boldsymbol{I} \tag{3.5}$$

が得られるから，a と $a^\dagger$ とはそれぞれ消滅・生成演算子である．するとノートIのV章で証明したことにより，$a^\dagger a$ は固有値 0, 1, 2, ⋯ をとる．

ところで，式 (3.4) を逆に解くと，

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\left\{a+a^\dagger\right\} \tag{3.6a}$$

$$p=-i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\{a-a^\dagger\} \tag{3.6b}$$

となり，

$$H=\frac{1}{2}\hbar\omega\{a^\dagger a+aa^\dagger\}=\hbar\omega\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right) \tag{3.7}$$

したがって，この行列の固有値は，

$$E_n=\hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\quad n=0,1,2,\cdots \tag{3.8}$$

となる．量子力学では固有値が物理系のとりうる値であるから，式 (3.1) が得られる．

式 (3.6) を見ればわかるように，a や $a^\dagger$ は x や p の振幅である．したがって，量子力学では，調和振動子は振幅が生成・消滅演算子になっており，その2乗がとびとびの値 0, 1, 2, ⋯ をとる．エネルギーとしては，図 9.3 のように，

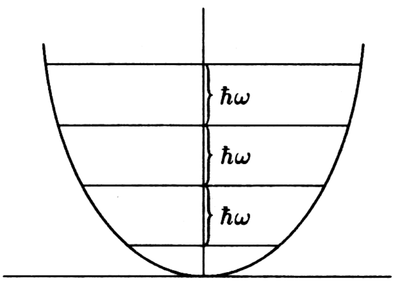


図 9.3

等間隔に並んだレベルだけが可能である．この等間隔というのが，粒子像を得る場合に重要なのである．式 (3.8) によると，量子論的調和振動子は，エネルギー $\hbar\omega$ の単位からできていることがわかる．最後の項 $\hbar\omega/2$ は最低エネルギー状態で，その上に何個 $\hbar\omega$ がのっているかを指定すると，調和振動子のエネルギーは決まる．これが，今世紀はじめ Planck が到達したエネル

ギー量子である．Planck は熱輻射の問題を分析しているとき，電磁場を調和振動子に分解して，正しい輻射公式を得るためには，これらの調和振動子が $\hbar\omega$ というエネルギー量子からできていると考えなければならないという結論に達した．同じころ Einstein が光量子説を提出していた．

x と p が，無限の行列であり，それらが式 (3.3) の交換関係を満たすのをみるためには，ノート I の V 章の式 (2.22) を使えばよい．これは演習問題にしておく．

場を調和振動子に分解する方法を述べるまえに，量子論的調和振動子について注意しておかなければならない事情がもう 1 つある．

上の議論では，Hamiltonian (3.2) をとり，x と p に関して演算子の関係 (3.3) をおいたが，演算子を考えるなら何も式 (3.3) でなくても，

$$x^2 = \frac{\hbar}{2\omega} \tag{3.9a}$$

$$p^2 = \frac{\hbar\omega}{2} \tag{3.9b}$$

$$xp + px = 0 \tag{3.9c}$$

のようなものでもよい．このときは Hamiltonian として，

$$H = i\omega xp \tag{3.10}$$

ととっておけば，やはり調和振動子が得られるのである．式 (3.9) を満たすような量というのは奇妙にみえるかもしれないが，このような量は Pauli 行列で作ることができる．たとえば，

$$p = \sigma_1\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}} \tag{3.11a}$$

$$x = \sigma_2\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}} \tag{3.11b}$$

とおくと，式 (3.9) が満たされるということがすぐわかる．そして Hamiltonian は

$$H = i\omega\sigma_2\sigma_1\frac{\hbar}{2} = \frac{1}{2}\hbar\omega\sigma_3 \tag{3.12}$$

となる． σ_3 の固有値は ± 1 だから，この場合の H の固有値は $\hbar\omega/2$ と $-\hbar\omega/2$ である．これら 2 つの固有値の間隔は，やはり $\hbar\omega$ である．

式 (3.9)，(3.10) が調和振動子であることをみるには，量子力学的運動方

程式

$$i\hbar\dot{x} = [x,\ H] \tag{3.13a}$$

$$i\hbar\dot{p} = [p,\ H] \tag{3.13b}$$

を作ってみればよい．これも演習問題にしておく．角運動量のときと同じく Pauli 行列には位相の自由度があり，

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -ie^{i\phi} \\ ie^{-i\phi} & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{3.14}$$

と書いてもよかったことに注意．ここでは位相 ϕ は全く勝手で，運動の自由度はすべてこの中にはいる．

なお，この場合にも，式 (3.4) と同型の変換をすると，

$$C = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{\omega}p\right) = \frac{i}{2}\{\sigma_1 - i\sigma_2\} \tag{3.15a}$$

$$C^\dagger = \sqrt{\frac{\omega}{2\hbar}}\left(x - \frac{i}{\omega}p\right) = \frac{i}{2}\{\sigma_1 + i\sigma_2\} \tag{3.15b}$$

となる．これは角運動量のところでみたことのある演算子である．これらが，

$$\{C,\ C^\dagger\} = I \tag{3.16a}$$

$$\{C,\ C\} = \{C^\dagger,\ C^\dagger\} = 0 \tag{3.16b}$$

を満たすことを確かめておくとよい．この調和振動子は，振幅が前のように等間隔に無限まで続いてなく，ただ 2 つのエネルギーレベルしかとれないようなものである．

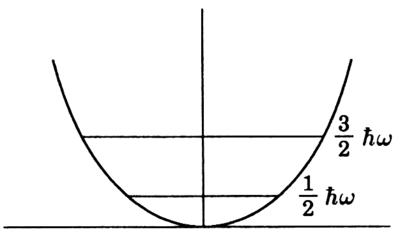


図 9.4

ここでは，Hamiltonian (3.10) と演算規則 (3.9) とを天下りに導入して申しわけなかったが，場の量子論へいくと，もっと自然に導入ができる．

最後に 1 つ注意しておくと，量子力学では，無限個のエネルギーレベルや，

たった2つのエネルギーレベルをもつ調和振動子だけでなく，一般に3個，4個，……の任意の有限個のエネルギーレベルをもつ調和振動子が考えられる．いまのところ，はじめの2つの場合しか使われていない．

§4. Schrödingerの方程式を満たす場

Schrödinger の方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{x},\ t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x,\ t) \tag{4.1}$$

で，この ψ は以下にみるように，調和振動子の集まりである．

まず，この場が一辺 L の立方体の中に限られているとして，ノートIのII章§4のように，空間変数について Fourier 変換すると，

$$\psi(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}a_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{4.2}$$

となる．

これを式 (4.1) に代入すると，各 Fourier 係数について，

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a_{\boldsymbol{k}}(t) = \frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2 a_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{4.3}$$

が成り立つことがわかる．もちろんこの複素共役式も成り立ち，

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\boldsymbol{k}^2 a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t) \tag{4.4}$$

式 (3.6) と同じように，

$$q_{\boldsymbol{k}}(t) \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}\{a_{\boldsymbol{k}}(t) + a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)\} \tag{4.5a}$$

$$p_{\boldsymbol{k}}(t) \equiv -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}\{a_{\boldsymbol{k}}(t) - a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)\} \tag{4.5b}$$

という変数を導入する．ただし，

$$\omega_k = \frac{\hbar}{2m}\boldsymbol{k}^2 \tag{4.6}$$

ととった．

すると，式 (4.3)，(4.4) により，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}q_{\boldsymbol{k}}(t) = p_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{4.7a}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_{\boldsymbol{k}}(t) = -\omega_k^2 q_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{4.7b}$$

が得られる．これは，文句なしに調和振動子の運動方程式である．つまり，Schrödinger 方程式を満たす場の空間変数に対する Fourier 成分を，式 (4.5) によって $q_{\boldsymbol{k}}$ と $p_{\boldsymbol{k}}$ で書いてみると，それらは式 (4.7) という調和振動子の運動方程式を満たす．Fourier の逆変換は可能だから，式 (4.7) と (4.1) とは，式 (4.6) のもとに完全に同等である．

調和振動子の Hamiltonian は，式 (3.2) または (3.10) である．ここで式 (3.2) のほうを採用すると，Schrödinger 場の Hamiltonian は，

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\{p_{\boldsymbol{k}}(t)p_{\boldsymbol{k}}(t) + \omega_k^2 q_{\boldsymbol{k}}(t)q_{\boldsymbol{k}}(t)\} \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}}\hbar\omega_k\{a_{\boldsymbol{k}}^\dagger(t)a_{\boldsymbol{k}}(t)\} + \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\hbar\omega_k \end{aligned} \tag{4.8}$$

である．これを Fourier 逆変換して ψ に戻すと，

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\int_V \mathrm{d}^3x\, \nabla^\dagger\psi(\boldsymbol{x},\, t)\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{x},\, t) \tag{4.9}$$

となる．計算は，自分で手を使ってやってほしい．ただし，式 (4.8) の右辺の最後の項は落とした．

場の量子論では，上に出てきた $a_{\boldsymbol{k}}$ と $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ とを，それぞれ粒子の生成・消滅演算子とする．これらは，各 $\boldsymbol{k}$ についてノート I の V 章式 (2.1) の交換関係を満たす．すると，ψ は単なる数ではなく，

$$\begin{aligned} [\psi(\boldsymbol{x},\, t),\, \psi^\dagger(\boldsymbol{x}',\, t)] &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}e^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}'}[a_{\boldsymbol{k}}(t),\, a_{\boldsymbol{k}'}^\dagger(t)] \\ &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}'} = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \end{aligned} \tag{4.10}$$

を満たすような交換不可能な演算子の場になる．最後のところでは，ノート I, p.49 のデルタ関数の表示 (5.9) を用いた．このような場からできた物理系の Hamiltonian は式 (4.8) で，その固有値は $\hbar\omega_k$ の整数倍になる項からできている．というのは，式 (4.8) の $a_{\boldsymbol{k}}^\dagger a_{\boldsymbol{k}}$ の固有値は 0, 1, 2, $\cdots$ だからである．$\boldsymbol{k}$ というラベルをもったエネルギー量子 $\hbar\omega_k$ が，0 個，1 個，2 個，$\cdots$ と存在しうることとなる．この意味で，これらの量子は Bose 統計に従う粒子で

ある．$\boldsymbol{k}$ というラベルは波の波数ベクトルで，あとで Maxwell の方程式のときにみるように，ラベル $\boldsymbol{k}$ をもった量子は，運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもっていることがわかる．関係 (4.6) により，量子のエネルギー運動量関係は，

$$\hbar\omega_k = \frac{1}{2m}(\hbar\boldsymbol{k})^2 \tag{4.11}$$

となり，古典的な粒子のものと同じである．

§5. 波動方程式を満たす場

次に時間に関して 2 階の微分を含む波動方程式

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c_s^2 \nabla^2\right\}u(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{5.1}$$

を考えよう．c_s は速度の次元をもった定数である．式 (5.1) は波動方程式として知られているが，空気中を伝わる音の波は，この方程式で記述される．固体中のイオンの歪みが伝わるのも，近似的にこの方程式にしたがう．このタイプの場も調和振動子に分解できる．ここではもう少し一般化して，

$$\left\{\frac{\partial^2}{\partial t^2} - c_s^2 \nabla^2 + \kappa^2\right\}u(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{5.2}$$

という方程式を考えよう．ここに κ は実数の定数である．これを **Klein-Gordon の方程式**とよぶ．定数κが 0 になると式 (5.2) は (5.1) に戻る．Klein-Gordon 方程式の一般解については，ノート I の III 章§8 で触れた．

あとでわかるように，κ^2 の前の符号が時間微分の前の符号と同じならば，調和振動子に分解できるが，符号が反対だと調和振動子にはならない．これはたいせつな点である．前者の場合は粒子像が描けるが，後者だとそれが不可能になるからである．

例によって，場を立方体の中に入れ，空間変数について Fourier 分解する．

$$u(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} q_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{5.3}$$

とおくと，$u(\boldsymbol{x},\ t)$ が実数のとき，Fourier 係数は，

$$q_{-\boldsymbol{k}}(t) = q_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t) \tag{5.4}$$

を満たす複素数でないとつじつまがあわない．

式 (5.3) を (5.2) に代入すると，各 Fourier 成分について，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}q_{\boldsymbol{k}}(t)+(c_s^2\boldsymbol{k}^2+\kappa^2)q_{\boldsymbol{k}}(t)=0 \tag{5.5}$$

が成立する．いま，

$$\omega_k^2\equiv c_s^2\boldsymbol{k}^2+\kappa^2\geq 0 \tag{5.6}$$

とおくと，式 (5.5) は，

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}q_{\boldsymbol{k}}(t)=-\omega_k^2 q_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{5.7}$$

で，これはまさに調和振動子の方程式である．式 (2.6) との違いは，ここでは $q_{\boldsymbol{k}}(t)$ が複素数であるということだけである．しかし，複素数はいつでも 2 つの実数で書くことができるから，式 (5.7) と (2.6) とは $\omega_{\boldsymbol{k}}$ の値が違うだけで，調和振動子であることには変わりはない．

通常は§2 でやったように，この方程式を，変数の数をふやして，時間に関して 1 回微分の方程式に直す．それには，

$$\dot{q}_{\boldsymbol{k}}(t)=p_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)=p_{-\boldsymbol{k}}(t) \tag{5.8a}$$

を導入し，式 (5.7) を，

$$\dot{p}_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)=-\omega_k^2 q_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{5.8b}$$

と書く．式 (5.8) は 2 式で式 (5.7) と同等である． $q_{\boldsymbol{k}}$ の時間微分を， $p_{\boldsymbol{k}}$ ではなく $p_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}$ と書いたのは，あとですべてを場の量に戻すときの便宜にすぎない．

ここで思い出してほしいのは， κ^2 の前の符号のことである．もしこれがマイナスだと，式 (5.6) の κ^2 の前の符号もマイナスになる．すると式 (5.6) の右辺は必ずしも正でなくなり，式 (5.7) は必ずしも調和振動子にはならない．それは， $c_s^2\boldsymbol{k}^2$ が κ^2 よりも小さいときに起こる．Fourier 成分の中には小さな $\boldsymbol{k}$ も含まれているから，いつでも調和振動子でない成分が出てくることになる．したがって，波動方程式 (5.2) の κ^2 の前の符号は，いつでも時間微分の項と同じにとっておかなければ，粒子像が描けないのである． ∇^2 の前の符号も同様に，時間微分の項とは反対にとっておかないと調和振動子にならない．

いったん調和振動子に直れば，Hamiltonian を作るのは容易で，

$$H = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\{p_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}p_{\boldsymbol{k}} + \omega_k^2 q_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}q_{\boldsymbol{k}}\} \tag{5.9}$$

ととればよい．そしてこれを Fourier の逆変換で，場の量に直せばよい．すると，

$$H = \frac{1}{2}\int_V \mathrm{d}^3x\{\pi(\boldsymbol{x},t)\pi(\boldsymbol{x},t) + c_s^2\,\nabla u(\boldsymbol{x},t)\cdot\,\nabla u(x,t) + \kappa^2 u(\boldsymbol{x},t)u(\boldsymbol{x},t)\} \tag{5.10}$$

となる（計算は再び演習問題）．ただし，

$$\pi(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} p_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} p_{\boldsymbol{k}}(t)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.11a}$$

$$u(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} q_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}(t)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} q_{\boldsymbol{k}}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{5.11b}$$

である．いうまでもなく，Hamiltonian には時間微分が含まれないように，$p_{\boldsymbol{k}}$ に対する場 $\pi(\boldsymbol{x},t)$ を導入した．式 (5.9) から (5.10) を導くとき，条件 (5.8) を忘れないように．

場の理論屋はむしろ式 (5.10) から出発する．そして，上の式 (5.11) や，それらを生成・消滅演算子で書いた表現や運動方程式が頭に浮かぶ．調和振動子も頭に浮かぶ．ただし，このような計算を，H をみるごとにいちいちくり返すわけではなく，慣れたら H をみたとたん，このようなことが頭の中で自然に回転し，Hamiltonian (5.10) の固有値が目に浮かぶ．

くり返しになるが，この場合にも調和振動子を量子論的に扱うと，Hamiltonian は Boson の生成・消滅演算子で書くことができる．結果は，

$$H = \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_k\left\{a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}a_{\boldsymbol{k}} + \frac{1}{2}\right\} \tag{5.12}$$

となる．こう書くためには，

$$q_{\boldsymbol{k}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k}}\{a_{\boldsymbol{k}} + a_{-\boldsymbol{k}}^{\dagger}\} \tag{5.13a}$$

$$p_{\boldsymbol{k}} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2}}\{a_{-\boldsymbol{k}} - a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}\} \tag{5.13b}$$

とおくのがよい．すぐわかるように，

$$[p_{\boldsymbol{k}}, q_{\boldsymbol{k}}] = -i\frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\omega_k}{\omega_{k'}}}\{[a_{-\boldsymbol{k}},\ a_{-\boldsymbol{k}'}^{\dagger}] - [a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger},\ a_{\boldsymbol{k}'}] + [a_{-\boldsymbol{k}},\ a_{\boldsymbol{k}'}] - [a_{\boldsymbol{k}}^{\dagger},\ a_{-\boldsymbol{k}'}^{\dagger}]\} \tag{5.14}$$

が出るから,

$$[a_{\boldsymbol{k}},\ a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}] = \delta_{\boldsymbol{k},\ \boldsymbol{k}'} \tag{5.15a}$$

$$[a_{\boldsymbol{k}},\ a_{\boldsymbol{k}'}] = [a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}}, a^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}] = 0 \tag{5.15b}$$

を要求すると,

$$[p_{\boldsymbol{k}},\ q_{\boldsymbol{k}'}] = -i\hbar\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{5.16}$$

となる.逆に式 (5.16) から (5.15) を出してもよい.いずれにしろ,式 (5.12) の固有値は,

$$E\{n_{\boldsymbol{k}}\} = \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_k \left\{ n_{\boldsymbol{k}} + \frac{1}{2} \right\} \tag{5.17}$$

である.ここで,各 $\boldsymbol{k}$ について,

$$n_{\boldsymbol{k}} = 0, 1, 2, \cdots \tag{5.18}$$

である.式 (5.17) では,各 $\boldsymbol{k}$ についてエネルギーが $\hbar\omega_k$ という単位から成っており,この単位を 1 個,2 個,$\cdots$ と数えられるようになっている.この $n_{\boldsymbol{k}}$ を,ラベル $\boldsymbol{k}$,エネルギー $\hbar\omega_k$ をもった粒子の数と考える.したがって,方程式 (5.2) を満たす量子化された場 $u(x,t)$ は,エネルギー $\hbar\omega_k$ をもった量子からできているということができる.この量子は,$\kappa=0$ のとき,フォノンとよばれる.湯川中間子も似たようなもので,このときは c_s が光速 c,そして中間子の質量は $m=\hbar\kappa/c^2$ となる.

$\boldsymbol{k}$ は Fourier 展開により,無限の可能な値

$$\boldsymbol{k} = \frac{2\pi}{L}\boldsymbol{n} \quad \boldsymbol{n} = 0,\ \pm 1,\ \pm 2, \cdots \tag{5.19}$$

をとる.式 (5.19) の $\boldsymbol{n}$ と粒子数の $n_{\boldsymbol{k}}$ とを混同しないように.前者は可能なモードの数で,粒子数とは全く関係がない.

統計力学の正準集合をこれにあてはめてみよう.正準集合では,各モードを別々に扱うから,分配関数はすぐ計算できる.$\boldsymbol{k}$ というモードの分配関数は,

$$\sum_{n_{\boldsymbol{k}}=0}^{\infty} \exp\left\{-\beta\hbar\omega_k\left(n_{\boldsymbol{k}}+\frac{1}{2}\right)\right\}$$
$$=\exp\left(-\frac{1}{2}\hbar\omega_k\right)\{1+\exp(-\beta\hbar\omega_k)+\exp(-2\beta\hbar\omega_k)+\cdots\}$$
$$=\exp\left(-\frac{1}{2}\hbar\omega_k\right)\frac{1}{1-\exp(-\beta\hbar\omega_k)} \tag{5.20a}$$

したがって，全体では，すべてのモードについてかけあわせて，分配関数は

$$Z_c=\prod_{\boldsymbol{n}}\left\{\exp\left(-\frac{1}{2}\hbar\omega_k\right)\frac{1}{1-\exp(-\beta\hbar\omega_k)}\right\} \tag{5.20b}$$

となる．Bose 統計に特徴的な形が出てきた．エネルギーの平均値は，

$$\langle E\rangle_c=-\frac{\partial}{\partial\,\beta}\ln Z_c=-\frac{\partial}{\alpha\beta}\ln\left\{\exp\left(-\frac{1}{2}\hbar\omega_k\right)\frac{1}{1-\exp\left(-\beta\hbar\omega_k\right)}\right\}$$
$$=\sum_{\boldsymbol{n}}\left\{\frac{1}{2}\hbar\omega_k+\frac{\hbar\omega_k}{\exp(\beta\hbar\omega_k-1)}\right\} \tag{5.21}$$

この系を包む体積が大きいとすると，ノートIのII章，式 (6.1) が使えて，$\boldsymbol{k}$ についての和を積分でおきかえることができる．つまり，

$$\sum_{\boldsymbol{n}}\rightarrow\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\int \mathrm{d}^3k \tag{5.22}$$

とおきかえる．すると，エネルギーの平均密度は，

$$\frac{\langle E\rangle_c}{V}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\left\{\frac{1}{2}\hbar\omega_k+\frac{\hbar\omega_k}{\exp(\beta\hbar\omega_k)-1}\right\} \tag{5.23}$$

となる．ただし，

$$V=L^3 \tag{5.24}$$

式 (5.23) の右辺第 1 項は，すぐわかるように発散する．これはエネルギー固有値 (5.17) の，粒子数がゼロでも残る項によるものである．通常この項は，物理的に意味のないものとして，はじめから引き去っておく．するとエネルギーの平均密度は，

$$\frac{\langle E\rangle_c}{V}=\frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k\left\{\frac{\hbar\omega_k}{\exp(\beta\hbar\omega_k)-1}\right\} \tag{5.25}$$

となる．この項は，分母があるために発散しない．

κ が 0 の場合には，式 (5.6) により，

$$\omega_k=c_s k \tag{5.26}$$

だから，これを式 (5.25) に代入すると，積分は，公式

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x \frac{x^3}{e^{ax}-1} = \frac{1}{15}\left(\frac{\pi}{a}\right)^4 \tag{5.27}$$

によって遂行できる．細かい計算をしなくても，この場合には次元から，

$$\frac{\langle E \rangle_c}{V} \propto \left(\frac{1}{\beta}\right)^4 \propto T^4 \tag{5.28}$$

という結果が得られる．つまりエネルギーの平均密度は温度の 4 乗に比例する．

このような計算が，すべて調和振動子の量子論から出てきたことに注意してほしい．ただし，これに関連して最後に 1 つだけ注意しておくと， κ^2 の前の符号がマイナスのときには，Hamiltonian は式 (5.10) で κ^2 の前の符号を逆にしておく．一方， $\pi(x,t)$ と $u(x',t)$ との同時刻交換関係は， κ^2 の前の符号によらず，

$$[\pi(\boldsymbol{x},\ t), u(\boldsymbol{x}',\ t)] = -i\hbar\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$
$$[\pi(\boldsymbol{x},\ t), \pi(\boldsymbol{x}',\ t)] = [u(\boldsymbol{x},\ t),\ u(\boldsymbol{x}',\ t)] = 0 \tag{5.29a,b}$$

となる．そしてこれは量子論の基本原理と矛盾しない．別の言葉でいうと， κ^2 の前の符号に無関係に，量子論的取り扱いが可能である．にもかかわらず， κ^2 の前の符号を正にとっておかないと，粒子像は得られない．

§6. Maxwell の場と調和振動子

Maxwell の方程式を SI 単位系で書くと，

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.1a}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},\ t) + \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{6.1b}$$

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{6.1c}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) - \varepsilon_0\mu_0\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},\ t) = \mu_0 \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.1d}$$

である．使った記号はスタンダードなものだから，いちいち説明はいらないであろう．力学系との相互作用を論じるときには，これらのほかに Lorentz の力を導入しなければならない．が，これはいま考えない．

Maxwell の方程式は複雑な格好をしていて，だいたい方程式の数と変数の

数が一致していない．このままでは調和振動子の片りんさえみえない．実際以下に示すように，Maxwell の場の全体が調和振動子の集まりになるわけではなく，遠くのほうに電磁波として伝わっていく成分だけが，調和振動子になる．これはもちろん前もってわかるわけではなく，いろいろとやってみた結果である．その“いろいろ”をここでやってみせるのはかえって混乱するから，そこのところはとばして，まず $\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{J}$ とを縦成分と横成分に分ける．縦成分を $\boldsymbol{E}_L, \boldsymbol{J}_L$ と書く．横成分のほうは $\boldsymbol{E}_T, \boldsymbol{J}_T$ と書く．横とか縦とかいった意味はだんだんわかるが，数学的には，

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E}_T(x,\ t) = 0 \quad \nabla \cdot \boldsymbol{J}_T(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{6.2a}$$

$$\nabla \times \boldsymbol{E}_L(x,\ t) = 0 \quad \nabla \times \boldsymbol{J}_L(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{6.2b}$$

を意味する．

定義 (6.2a) から，横成分 $\boldsymbol{E}_T$ は，方程式 (6.1a) にはきかず，(6.1a) は，

$$\nabla \cdot \boldsymbol{E}_L(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.3a}$$

となる．式 (6.1b) のほうには，逆に縦成分はきかず，

$$\nabla \times \boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t) + \dot{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{6.3b}$$

となる．つまり Maxwell 方程式 (6.1a) と (6.1b) とは，それぞれ縦成分と横成分を別々に決める式である．

磁場 $\boldsymbol{B}$ のほうは，式 (6.1c) によりいつでも横成分しかなく，

$$\nabla \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{6.3c}$$

また，式 (6.1d) は，

$$\nabla \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) - \varepsilon_0\mu_0\dot{\boldsymbol{E}}_T(\boldsymbol{x},\ t) = \mu_0\boldsymbol{J}_T(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.3d}$$

となる．ただし，

$$\boldsymbol{J}_T(\boldsymbol{x},\ t) \equiv \boldsymbol{J}(\boldsymbol{x},\ t) + \varepsilon_0\dot{\boldsymbol{E}}_L(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.4}$$

である．

式 (6.3b) に戻り，その左から $\nabla\times$ をほどこして，ノート I，p.104 の公式 (4.7) を使うと，

$$\nabla \times \{\nabla \times \boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t)\} + \nabla \times \dot{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{x},\ t)$$

$$= -\nabla^2 \boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t) + \nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t)) + \frac{\partial}{\partial\ t}\{\mu_0 \boldsymbol{J}_T(\boldsymbol{x},\ t) + \varepsilon_0\mu_0 \dot{\boldsymbol{E}}_T(\boldsymbol{x},\ t)\}$$

$$= \{-\nabla^2 + \varepsilon_0\mu_0 \frac{\partial^{\,2}}{\partial\ t^2}\}\boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t) + \mu_0 \dot{\boldsymbol{J}}_T(\boldsymbol{x},\ t) = 0 \tag{6.5}$$

となる．ここで，式 (6.2a)，(6.3d) を用いた．$\varepsilon_0\mu_0 = 1/c^2$ を用いて書き直すと，

$$\left\{-\nabla^2 + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^{\,2}}{\partial\ t^2}\right\}\boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t) = -\mu_0 \dot{\boldsymbol{J}}_T(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.6}$$

が得られる．ここで調和振動子がみえてきたと思う．

磁場のほうは同様にして，

$$\left\{-\nabla^2 + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^{\,2}}{\partial\ t^2}\right\}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) = \mu_0\ \nabla \times \boldsymbol{J}_T(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.7}$$

となり，やはり調和振動子がみえてくる．これらの方程式をみると，電磁場が速度 c で走ることも明らかであろう．

電磁場に付随する物理量は，古典電磁気学でよく定義されている．その導出はここではやらないが，電磁エネルギー密度は，

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{2}\varepsilon_0 \boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x},\ t) + \frac{1}{2\mu_0}\boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.8a}$$

その流れは，

$$\boldsymbol{J}^{(\mathrm{e})}(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},\ t) \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.8b}$$

一方，電磁場の運動量の密度は，Poynting ベクトル

$$\boldsymbol{J}^{(\mathrm{p})}(\boldsymbol{x},\ t) = \varepsilon_0 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},\ t) \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.9}$$

で与えられ，その流れは Maxwell の応力テンソルである（これはいまいらないから，式を書かない．ついでながら，Poynting とは人の名前である）．

ベクトル場を Fourier 変換する方法は，ノート I の II 章§6 で説明した．それをいま $\boldsymbol{E}_T$ と $\boldsymbol{B}$ に応用してみる．$\boldsymbol{e}_k^{(3)}$ として $\boldsymbol{k}$ の方向の単位ベクトルをとると，$\boldsymbol{e}_k^{(1)}$ と，$\boldsymbol{e}_k^{(2)}$ とは，$\boldsymbol{k}$ に直交する．それらを使って，

$$\boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{i}{\sqrt{V}}\sum_{r=1,2}\sum_{\boldsymbol{k}}\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0}}\boldsymbol{e}^{(r)}(\boldsymbol{k})$$
$$\times\{a_{\boldsymbol{k}}^{(r)}(t)e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} - a_{\boldsymbol{k}}^{(r)\dagger}(t)e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\} \tag{6.10}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\,t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{r=1,2} \sum_{\boldsymbol{k}} \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k \varepsilon_0}} \boldsymbol{k} \times \boldsymbol{e}^{(r)}(\boldsymbol{k})$$

$$\times \{a_{\boldsymbol{k}}^{(r)}(t) e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} - a_{\boldsymbol{k}}^{(r)\dagger}(t) e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\} \tag{6.11}$$

を得る．ここで，

$$\omega_k = ck \tag{6.12}$$

である．

無造作にこれらの式を書いたが，これらを係数までちゃんと出すには少々骨がおれる．いろいろやってみて，これがいちばん都合がよい形であると判断したわけである．都合がよいという意味は，これらがMaxwellの方程式を満たし，かつ全体系のエネルギーが，下の式(6.14)になるということである．$\boldsymbol{E}_T$ と $\boldsymbol{B}$ とは横成分だから，これらはそれぞれ式(6.2a)，(6.3c)を満たさなければならない．それは2つのベクトル $\boldsymbol{e}_k^{(1)}$ と $\boldsymbol{e}_k^{(2)}$ が $\boldsymbol{k}$ に直交するようにとってあるから，明らかであろう．

さて，式(6.3b)や(6.3d)は満たされているだろうか？　一般の場合，つまり $\boldsymbol{J}_T$ が0でない場合の証明はややこしいから，ここで，

$$\boldsymbol{J}_T = 0 \tag{6.13}$$

の場合だけ調べよう．式(6.13)をとると，式(6.3d)，(6.6)，(6.7)の右辺は0である．それを満たすのは容易で，

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} a_{\boldsymbol{k}}^{(r)}(t) = \omega_k a_{\boldsymbol{k}}^{(r)}(t) \tag{6.14a}$$

$$i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} a_{\boldsymbol{k}}^{(r)\dagger}(t) = -\omega_k a_{\boldsymbol{k}}^{(r)\dagger}(t) \tag{6.14b}$$

とすればよい．これらは前に述べた調和振動子の方程式(2.5)と同じものである（それをみるには，式(5.13)を用いて $q_{\boldsymbol{k}}$ と $p_{\boldsymbol{k}}$ の変数に直せばよい）．

さて，式(6.10)および(6.11)を用いて，系の全エネルギー，すなわち式(6.8a)を1辺が L の立方体の内部にわたって積分したものを計算してみる．計算はややめんどうだが，高級な数学は使わないで，

$$H_T = \frac{1}{2}\int_V \mathrm{d}^3x \{\varepsilon_0 \boldsymbol{E}_T^2 + \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\} = \sum_{r=1,2}\sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_k \{a_{\boldsymbol{k}}^{(r)\dagger} a_{\boldsymbol{k}}^{(r)} + \frac{1}{2}\} \tag{6.15}$$

となる．これがほしかったから，$\boldsymbol{E}_T$と $\boldsymbol{B}$ を式(6.10)，(6.11)の形に書いた

のであった．この形 (6.15) は，いままでいやになるほど何度も出てきた．物理的解釈はもう容易であろう．

全運動量も，Poynting ベクトルを同じように積分して得られ，

$$\boldsymbol{G} \equiv \int_V \mathrm{d}^3x \boldsymbol{J}^{(\mathrm{p})} = \varepsilon_0 \int_V \mathrm{d}^3x \boldsymbol{E}_T \times \boldsymbol{B} = \sum_{r=1,2} \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar \boldsymbol{k} a_{\boldsymbol{k}}^{(r)\dagger} a_{\boldsymbol{k}}^{(r)} \tag{6.16}$$

となる．これは電磁場の運動量が $\hbar\boldsymbol{k}$ という単位からできていることを示している．式 (6.15) といっしょにすると，電磁場はエネルギー $\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$，運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ の単位からできていることになる．この単位を**光子** (photon, 光量子ともよぶ) という．これが光量子説の表現なのである．

§5 の計算に習って，光量子系の正準集合平均を計算すると，Planck の放射エネルギー分布が出るはずである．これはまたまた演習問題にする．

ことのついでに，いままで考えなかった縦成分がどんなものかを調べておこう．そのために式 (6.3a) まで戻る．縦成分には定義 (6.2b) という制限があるから，これを満たすために，

$$\boldsymbol{E}_L(\boldsymbol{x},\ t) = -\nabla A_0(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.17}$$

とおく．$A_0(x,\ t)$ とはあるスカラー関数で，こうおいておくと定義 (6.2b) は自動的に満たされるから，もう式 (6.2b) は考えなくてよい．そこで，式 (6.17) を式 (6.3a) に代入すると，

$$\nabla^2 A_0(\boldsymbol{x},\ t) = -\frac{1}{\varepsilon_0}\rho(\boldsymbol{x},\ t) \tag{6.18}$$

が得られる．これを積分するのは容易であろう．

$$\nabla^2 \frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} = -4\pi\delta(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') \tag{6.19}$$

を Green 関数として使うと，

$$A_0(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int_V \mathrm{d}^3x \frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \rho(\boldsymbol{x}',\ t) \tag{6.20}$$

となる．式 (6.17) にこれを代入すると，

$$\boldsymbol{E}_L(\boldsymbol{x},\ t) = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \int_V \mathrm{d}^3x\, \nabla \frac{1}{|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'|} \rho(\boldsymbol{x}',\ t) \tag{6.21}$$

となる．これは電荷分布 $\rho(\boldsymbol{x}, t)$ による Coulomb 場である．

ベクトル場を扱ったついでに，ノート I の IV 章で触れたスピンのことをちょっと思い出しておこう．ノート I，p.114 の表 4.1 によると，ベクトル場

はスピン 1 をもつ．したがって，電磁場に付随する量子，光量子はスピン 1 をもつ．いいかえると，光量子は先天的に角運動量 $1(\times\hbar)$ をもっている．

§7. 再び Schrödinger 場について（Fermi 統計に従う粒子）

いままで，場を調和振動子に分解し，しかも各調和振動子を，Bose 粒子の生成・消滅演算子で表現してきた結果，場はエネルギー $\hbar\omega_k$，運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもった Bose 粒子の集団となった．

そこで，Fermi 粒子の集団を得るにはどうしたらよいかを考えよう．再び Schrödinger 方程式に戻り，式 (4.2) と同じように，

$$\psi(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} C_{\boldsymbol{k}}(t) \tag{7.1}$$

と Fourier 展開する．式 (4.3)，(4.7) の計算は，$C_{\boldsymbol{k}}$ でもそのままあてはまるから，調和振動子の構造は同じである．ただし，今回は式 (3.16) を満たすような演算子を考え，

$$C_{\boldsymbol{k}}(t)C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}(t) + C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}(t)C_{\boldsymbol{k}}(t) \equiv \{C_{\boldsymbol{k}}(t),\ C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}'}(t)\} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{7.2a}$$

$$C_{\boldsymbol{k}}(t)C_{\boldsymbol{k}'}(t) + C_{\boldsymbol{k}'}(t)C_{\boldsymbol{k}}(t) \equiv \{C_{\boldsymbol{k}}(t),\ C_{\boldsymbol{k}'}(t)\} = 0 \tag{7.2b}$$

とする．すると，

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_k C^{\dagger}_{\boldsymbol{k}} C_{\boldsymbol{k}} \\
&= \frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3x \int_V \mathrm{d}^3x' \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_k \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x},\ t)\psi(\boldsymbol{x}',\ t)\exp\{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\} \\
&= \frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3x \int_V \mathrm{d}^3x' \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\hbar^2\boldsymbol{k}^2}{2m} \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x},\ t)\psi(\boldsymbol{x}',\ t)\exp\{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\} \\
&= \frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3x \int_V \mathrm{d}^3x' \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\hbar^2}{2m} \exp\{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\}\ \nabla\psi^{\dagger}(\boldsymbol{x},\ t)\cdot\ \nabla'\psi(\boldsymbol{x}',\ t) \\
&= \int_V \mathrm{d}^3x \int_v \mathrm{d}^3x' \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\hbar^2}{2m}\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\ \nabla\psi^{\dagger}(\boldsymbol{x},\ t)\cdot\ \nabla'\psi(\boldsymbol{x}',\ t) \\
&= \int_V \mathrm{d}^3x \frac{\hbar^2}{2m}\ \nabla\psi^{\dagger}(\boldsymbol{x},\ t)\cdot\ \nabla\psi(\boldsymbol{x},\ t)
\end{aligned} \tag{7.3}$$

となり，式 (4.9) と同型ではあるが，$\psi(x,t)$ の演算子としての性質は違った

ものになる．式 (4.10) のかわりに，

$$\begin{aligned}\{\psi(\boldsymbol{x},\ t),\ \psi^{\dagger}(\boldsymbol{x}',\ t)\} &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}\{C_{\boldsymbol{k}},\ C_{\boldsymbol{k}'}\}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\exp(-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{x}')\\ &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\boldsymbol{k}'}\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\exp(-i\boldsymbol{k}'\boldsymbol{x}')\\ &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\exp\{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\} = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \qquad (7.4\text{a})\end{aligned}$$

$$\{\psi(\boldsymbol{x},\ t),\ \psi(\boldsymbol{x}',\ t)\} = 0 \qquad (7.4\text{b})$$

となる．そして式 (7.3) の固有値は，ノート I の V 章でみたように，

$$E\{n_{\boldsymbol{k}}\} = \sum_{\boldsymbol{k}}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}n_{\boldsymbol{k}} \qquad (7.5)$$

で，この場合，

$$n_{\boldsymbol{k}} = 0 \text{ または } 1 \qquad (7.6)$$

である．つまり，$\hbar\omega_k$ というエネルギーをもった量子は，0 個か 1 個しかありえないことになる．したがって，これは Fermi 統計に従う粒子である．粒子は運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもっているので，Schrödinger 場の全運動量をつくると，

$$\boldsymbol{P} = \sum_{\boldsymbol{k}}\hbar\boldsymbol{k}C_{\boldsymbol{k}}^{\dagger}C_{\boldsymbol{k}} = \frac{\hbar}{i}\int_V \mathrm{d}^3x\psi^{\dagger}(\boldsymbol{x},\ t)\,\nabla\psi(\boldsymbol{x},\ t) \qquad (7.7)$$

である．これは，Fermi 粒子でも Bose 粒子でも同じ形になる．

ついでに，正準集合の分布関数を計算してみると，

$$Z_c = \prod_{\boldsymbol{k}}\sum_{n_{\boldsymbol{k}}=1,2}\exp(-\beta\hbar\omega_k n_k) = \prod_{\boldsymbol{k}}\{1+e(-\beta\hbar\omega_k)\} \qquad (7.8)$$

となり，Fermi 粒子系に特徴的な分布になる．

最後の疑問は，どのようなときに Fermi 粒子の演算子を使い，どのようなときに Bose 粒子の演算子を仮定するのかということであろう．この答えは，非相対論的な場の理論の中にはいまのところ存在せず，相対論的な場の理論まで待たなければならない．相対論的場の理論では，**Pauli の定理**というのがあって，整数スピンをもった場（スカラーやベクトル場，たとえば湯川粒子，フォノン，光子など）では，式 (5.15) のような Bose 演算子を用い，半奇整数スピンをもった場（スピノルの足を奇数個もった場，たとえば電子，陽子，中性子など）に対しては，式 (7.2) ような Fermi 演算子を用いなければいけ

ない．そうしないと，エネルギーが負になってしまったり，因果律に矛盾したりする．

§8. 場の理論の立場

いままで，いくつかの場を調和振動子に書き直す手法を披露してきたが，なぜこんな回り道をとるのかという疑問に答えておかなければならない．つまり，なぜ場から出発して調和振動子にもっていかなければならないのか？調和振動子がほしいのなら，場から出発しないで，なぜ調和振動子の集まりから出発しないのか？

場から出発する理由は，少なくとも3つある．1つは歴史的なもので，電磁場は量子論が出る前に発見されていた．そして，その電磁場が粒子性をもつことがあとで発見された．第2の理由は，すべての場が調和振動子に帰着されるわけではないという事実，それは§6の最後でみたように，Coulomb場などに現れる．

第3の理由は，これが最もたいせつなのだが，場の立場では，空間の回転に対する変換性が明瞭なのである．場は，ノートIのIV章で説明したように，空間の回転に対する性質から，スカラー，スピノル，ベクトルなどと分類される．これらを調和振動子に分解してしまうと，変換性がみえなくなる．スカラー，スピノル，ベクトルで書いておくと，発達したテンソル解析や微分幾何学を自由に使うことができる．したがって，物理系の対称性を基本とする現代の基礎物理学には，調和振動子というイメージはたいせつでも，その形式は不便なのである．あまり形式にとらわれすぎて，調和振動子のイメージをたびたび忘れてしまう人々もいるにはいるが．

演習問題 IX

1.　Hamiltonian (2.7) から，正準方程式により調和振動子の方程式を導け．

2.　Hamiltonian (3.2) をもつ量子論的調和振動子で，最低エネルギー状態の固有ベクトルは，$a|0\rangle = 0$ および $\langle 0|0\rangle = 1$ を満たす．このとき，

$$\langle 0|x|0\rangle \qquad \langle 0|p|0\rangle \qquad \langle 0|x^2|0\rangle \qquad \langle 0|p^2|0\rangle$$

を計算せよ．

3.　前問の調和振動子で，x と p の揺らぎ，Δx と Δp を計算し，不確定性関係

$$\Delta x \times \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$$

を確かめよ．ただし，Δx と Δp は，

$$(\Delta x)^2 \equiv \langle 0|x^2|0\rangle - (\langle 0|x|0\rangle)^2$$
$$(\Delta p)^2 \equiv \langle 0|p^2|0\rangle - (\langle 0|p|0\rangle)^2$$

で定義される．

4.　式 (3.6) と，ノート I，p.140 の式 (2.22) を用い，x と p の行列表示を求めよ．

5.　代数関係 (3.9) と運動方程式 (3.13) を用いて，x と p が調和振動子の運動方程式を満たすことを確認せよ．

6.　式 (4.8) に Fourier 逆変換を用い，式 (4.9) を導け．

7.　交換関係 (4.10) を確かめよ．また，

$$[\psi(\boldsymbol{x},\ t),\ \psi(\boldsymbol{x}',\ t)]$$

を計算せよ．

8.　式 (5.4) を確かめよ．

9.　式 (5.9) から式 (5.10) を導きだしてみよ．また逆に式 (5.10) から式 (5.9) を導け．

10. 式 (5.9) に式 (5.13) を代入し，式 (5.12) を導け．

11. 式 (5.11) で与えられた2個の量の，同時刻における交換関係を式 (5.16) を用いて計算してみよ．

12. Maxwell 方程式から，式 (6.6)，(6.7) を導く計算を，本文を見ないでおいかけてみよ．

13. 式 (6.8) において，

$$\frac{\partial}{\partial t}\mathcal{E}(\boldsymbol{x},\ t) + \nabla \cdot \boldsymbol{J}^{(\mathrm{e})}(\boldsymbol{x},\ t) = 0$$

が満たされていることを確認せよ．

14. 式 (6.8b) と (6.9) を比べると，

$$\boldsymbol{J}^{(\mathrm{e})}(\boldsymbol{x},\ t) = \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0}\boldsymbol{J}^{(p)}(\boldsymbol{x},\ t) = c^2 \boldsymbol{J}^{(\mathrm{p})}(\boldsymbol{x},\ t)$$

が成り立っている．これは物理的に何を意味するのであろうか？

15. 式 (6.10)，(6.11) が，Maxwell の方程式

$$\nabla \times \boldsymbol{E}_T(\boldsymbol{x},\ t) + \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},\ t) = 0$$

を満たすことを示せ．ただし，

$$i\dot{a}_{\boldsymbol{k}}^{(r)}(t) = \omega_k a_{\boldsymbol{k}}^{(r)}(t)$$

とする．

16. 式 (6.15) の最後の表現を導け．

17. 式 (6.15) に正準集合理論をあてはめ，Planck の放射分布式を導け．

18. 式 (7.3) を，本文を見ずに導いてみよ．

19. 式 (7.8) から，

$$\langle E \rangle_c = -\frac{\partial}{\partial \beta}\ln Z_c$$

によって，Fermi 分布の平均エネルギーを計算せよ．

X. 変　分　法

§1. は　じ　め　に

理論物理学において，変分法がよく用いられることは，解析力学や量子力学の近似法などに関連してよくご存じのことと思う．解析力学における変分法は何だか形式的でわかりにくいし，量子力学では，変分法を Ritz の方法と関連して，近似方法の1つとして勉強するためにその本質を見逃しがちである．そこでこの章では，変分法を復習しておくことにしよう．量子力学でも統計力学でも，近似方法としてのみならず，理論全体の一貫性を保証するだいじな道具が変分法なのである．

変分法のことについては，拙著“量子力学を学ぶための解析力学入門”（講談社）で少々触れたので，ここではあまり初等的なことは述べない．変分法は，Lagrange の未定係数法といっしょにして使うことが多いが，このことも拙著で説明したので，既知として進む．

変分法の基礎になるのは，次の定理である．

関数 $F(x)$ が変域 $(a,\ b)$ で連続，また $\eta(x)$ と，$\eta(x)$ の微分が同じ変域で連続，かつ $\eta(a)=\eta(b)=0$ なる任意の関数とする．このとき，もし，

$$\int_a^b \mathrm{d}x F(x)\eta(x) \equiv 0 \tag{1.1}$$

なら，$a < x < b$ 内のいたるところで，

$$F(x) = 0 \tag{1.2}$$

である．

この定理の証明はやさしいから，ここでは行なわない．もし式 (1.2) が成り立たないなら，$\eta(x)$ を適当に選ぶことによって，式 (1.1) と矛盾してしまうことをいえばよい．この定理は変分法のいたるところで使われる．

いま $F(x)$ が，ある関数 $f(x)$ とその微分 $f_x(x)$ の関数であるとし，

$$I \equiv \int_a^b \mathrm{d}x\, F[f(x),\, f_x(x)] \tag{1.3}$$

とおこう．この積分の値は，もちろん関数 $f(x)$ に依存する．この $f(x)$ を任意の無限小関数 $\eta(x)$ だけ変化させると，積分の値 I も無限小だけ変化するから，それを $I + \delta I$ とする．すなわち，

$$I + \delta I \equiv \int_a^b \mathrm{d}x\, F[f(x) + \eta(x),\, f_x(x) + \eta_x(x)] \tag{1.4}$$

$\eta(x)$ は無限小だから，それで右辺を展開して，2 次以上の無限小を省略すると，

$$\begin{aligned} I + \delta I &= \int_a^b \mathrm{d}x \left\{ F + \frac{\partial\ F}{\partial\ f(x)}\eta(x) + \frac{\partial\ F}{\partial\ f_x(x)}\eta_x(x) \right\} \\ &= I + \int_a^b \mathrm{d}x \left\{ F + \frac{\partial\ F}{\partial\ f(x)} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial\ F}{\partial\ f_x(x)} \right\}\eta(x) \\ &\quad + \int_a^b \mathrm{d}x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left\{ \frac{\partial\ F}{\partial\ f_x(x)}\eta(x) \right\} \end{aligned} \tag{1.5}$$

最後の項は積分の上限と下限の値で書かれ，

$$\begin{aligned} \delta I = \int_a^b \mathrm{d}x \left\{ \frac{\partial\ F}{\partial\ f(x)} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\partial\ F}{\partial\ f_x(x)} \right\}\eta(x) \\ + \frac{\partial\ F}{\partial\ f_x(x)}\eta(x)\bigg|_a^b \end{aligned} \tag{1.5$'$}$$

となる．右辺第1項の被積分関数は，ノートIのI章で導入したEuler-Lagrange微分であることに注意．式 (1.5′) は，この段階では，無限小の任意の関数 $\eta(x)$ に対して成り立つ単なる恒等式である．というよりも，δI の定義であると

考えたほうがよいかもしれない．

また，恒等式 (1.5′) は，多変数関数の場合にも容易に拡張できる．結果だけ書いておくと，

$$
\begin{aligned}
\delta I = \int_V dxdy\cdots\Big\{ & \frac{\partial F}{\partial f(x,y,\cdots)} - \frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial F}{\partial f_x(x,y,\cdots)} \\
& - \frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial F}{\partial f_y(x,y,\cdots)} - \cdots\Big\}\eta(x) \\
& + \int_{\partial V}\Big\{dS_x\frac{\partial F}{\partial f_x} + dS_y\frac{\partial F}{\partial f_y} + \cdots\Big\}\eta(x) \qquad (1.6)
\end{aligned}
$$

となる．右辺第 2 項は，Gauss の定理を用いて，領域 V にわたる積分を，表面 ∂V にわたる積分に直した項である．

F が $f(x,y,\cdots)$ だけでなく，2 個以上の関数の関数である場合への形式的拡張も容易であるから，ここではいちいち説明しない．

また，関数 F の中にもっと高階の微分が含まれていてもよい．しかし，前章までの例でみたように，従属関数の数をふやすことによって，いつでも微分の回数を下げることができるので，ここでは F がある関数（複数）の 1 階微分までしか含んでいない場合に話を限る．

§2.　力学における変分原理に関する注意

変分法を物理に関連して使う場合，きわめて抽象的に運動方程式を導いたりする場合と，反対に，具体的に運動方程式を解いたり近似解を探したりする場合とがある（変分法はその他にも使われるが）．前者に関しては，解析力学でおなじみであろう．しかし，変分法は解析力学のはじめであって，運動方程式を変分原理から導いてからあとがたいへんであり，それから一貫して諸々の物理量を定義したり，それらの間の関係式を導いたりする．

Lagrangian というたった 1 つの量から，運動方程式だけでなく，物理量の定義とか保存量とか，すべての力学量を一貫して取り扱っていこうというのが基本的なアイディアである．運動方程式だけを問題にするのだったら，何もわざわざ変分原理に戻る必要もなかろう．Lagrangian というたった 1 つの

量から，一定の処方によって，物理系全体の無矛盾性を保証していこうというわけである．たとえば，出発点の Lagrangian に近似を入れておくと，それから出てくる運動方程式の間の無矛盾性も保証されるし，それに付随する物理量の定義もすべて一貫していくのである．さらにノートＩのＩ章で述べたように，Euler-Lagrange 微分は，変数変換に対して一定の変換性をもつから，したがって，Euler-Lagrange 方程式は変数変換に対して不変である．このことを利用すると，物理量を記述するのに便利な変数への変換をたいへん楽に行なうことができる．これらのことはノートＩに書いたから，ここでちょっと思い出してほしい．

2 個の質点からなる系を考える．質点の位置をそれぞれ $\boldsymbol{x}^{(1)}$ と $\boldsymbol{x}^{(2)}$，各質量を m_1, m_2 とするとき，通常は Lagrangian を，

$$L=\frac{1}{2}m_1\dot{\boldsymbol{x}}^{(1)2}+\frac{1}{2}m_2\dot{\boldsymbol{x}}^{(2)2}-V(|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(2)}|) \tag{2.1}$$

と書く．V は，2 粒子の間に働くポテンシャルである．

力学の変分原理は，この Lagrangian を，ある時刻 t_1 から t_2 まで積分したものが，変数 $\boldsymbol{x}^{(1)}$ と $\boldsymbol{x}^{(2)}$ の変化に対して停留値をとると表現する．すなわち，

$$I\equiv\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\,L \tag{2.2}$$

を定義し，

$$\delta I=0 \tag{2.3}$$

とおく．このとき $\eta(t_1)=\eta(t_2)=0$ を満たす変分を考えると，前の恒等式 (1.5′) とノートＩのＩ章の基本定理によって，Euler-Lagrange の方程式

$$\frac{\partial\,L}{\partial\,\boldsymbol{x}^{(1)}}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{\boldsymbol{x}}^{(1)}}=0 \tag{2.4a}$$

$$\frac{\partial\,L}{\partial\,\boldsymbol{x}^{(2)}}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial\,L}{\partial\,\dot{\boldsymbol{x}}^{(2)}}=0 \tag{2.4b}$$

が，$\boldsymbol{x}^{(1)}$ と $\boldsymbol{x}^{(2)}$ の運動方程式となる．この場合，

$$m_1\ddot{\boldsymbol{x}}^{(1)}=-\nabla_1V(|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(2)}|) \tag{2.5a}$$

$$m_2\ddot{\boldsymbol{x}}^{(2)}=-\nabla_2V(|\boldsymbol{x}^{(1)}-\boldsymbol{x}^{(2)}|) \tag{2.5b}$$

である．

力学はこれがはじまりで，さらに L が与えられると，運動量は，

$$\boldsymbol{p}^{(1)} = \frac{\partial\ L}{\partial\ \dot{\boldsymbol{x}}^{(1)}} \tag{2.6a}$$

$$\boldsymbol{p}^{(2)} = \frac{\partial\ L}{\partial\ \dot{\boldsymbol{x}}^{(2)}} \tag{2.6b}$$

で定義され，Hamiltonian は，

$$H = \boldsymbol{p}^{(1)} \cdot \dot{\boldsymbol{x}}^{(1)} + \boldsymbol{p}^{(2)} \cdot \dot{\boldsymbol{x}}^{(2)} - L \tag{2.7}$$

から，時間微分を消去したものであると定義される．

そこで，へそ曲がりの宇宙人が現れ，式 (2.1) ではなく，

$$L' = m_1 \dot{\boldsymbol{x}}^{(1)} \cdot \dot{\boldsymbol{x}}^{(2)} + \frac{1}{2}(m_2 - m_1)\dot{\boldsymbol{x}}^{(2)2} + \frac{m_1}{m_2} V(|\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(2)}|) \tag{2.8}$$

という Lagrangian をもってきたとしよう．この Lagrangian L' を用いて，Euler-lagrange の方程式を作ってみると，確かに運動方程式 (2.5) が得られる（信じられなかったら，自ら手を使ってやってみられたい）．したがって，運動方程式だけに興味があるのならば，L でも，へそ曲がりの L' でも全く同等である．

では L と L' では何が違うのか？

L と L' を眺めてすぐ気がつくことは，粒子 1 と 2 は，L では対等に取り扱われているが，L' ではそうはなっていない．各粒子は同じ運動方程式に従って運動してはいるが，L で記述される 2 粒子系と，L' のそれとは何かが違っている．

まず L のほうから，運動量とエネルギーを式 (2.6)，(2.7) によって計算してみると，

$$\boldsymbol{p}^{(1)} = \frac{\partial\ L}{\partial\ \dot{\boldsymbol{x}}^{(1)}} = m_1 \dot{\boldsymbol{x}}^{(1)} \tag{2.9a}$$

$$\boldsymbol{p}^{(2)} = \frac{\partial\ L}{\partial\ \dot{\boldsymbol{x}}^{(2)}} = m_2 \dot{\boldsymbol{x}}^{(2)} \tag{2.9b}$$

したがって，Hamiltonian は，

$$H = \frac{1}{2m_1}\boldsymbol{p}^{(1)2} + \frac{1}{2m_2}\boldsymbol{p}^{(2)2} + V \tag{2.10}$$

というよく知られた形になる．

一方，L' のほうを使って同じ量を計算すると，

$$\boldsymbol{p}^{(1)} = m_1\dot{\boldsymbol{x}}^{(2)} \tag{2.11a}$$

$$\boldsymbol{p}^{(2)} = m_1\dot{\boldsymbol{x}}^{(1)} + (m_2 - m_1)\dot{\boldsymbol{x}}^{(2)} \tag{2.11b}$$

$$H' = \frac{1}{2}\frac{1}{m_1^2}(m_2 - m_1)\boldsymbol{p}^{(1)'2} + \frac{1}{m_1}\boldsymbol{p}^{(1)'}\cdot\boldsymbol{p}^{(2)'} - \frac{m_1}{m_2}V \tag{2.12}$$

というとんでもないものが出てくる．あいかわらず，1 と 2 に対して非対称になっている．宇宙の彼方では，式 (2.11) や (2.12) のほうがよいのかもしれない．われわれには珍奇なものだが，へそ曲がりの宇宙人たちは式 (2.11) や (2.12) を彼らなりに一貫して使っているということも可能である．

われわれが，L' ではなく L を採用する根拠は，運動方程式にだけあるのではなく，2 つの粒子に関する対称性や，エネルギーと運動量に関する関係 (2.10) に基づくものである．いいかえるならば，Lagrangian というものは，運動方程式よりもたくさんのインフォメーション（対称性とか，エネルギーや運動量の関係とか）をもったものである．同じ運動方程式を与えるからといって，L と L' とが同じとはいえない．

以下，上に述べたことはいちいち断らないが，もし異なった関数の変分が同じ方程式を与える場合に出くわしたら，いつでもこのことを思い出してほしい．

§3. Euler-Lagrange の方程式

以下，量子力学に出てくる微分方程式のあるものを変分の立場から調べていくが，実際に微分方程式の解を見つけるという仕事はここでは議論しない．微分方程式の解については，適当な成書を参照してほしい．たとえば，前に挙げた小谷・梅沢の参考書の付録には，いろいろな微分方程式の解がリストされている．ここで議論しようというのは，変分法の立場から，固有値問題を解くとき便利なように，微分方程式を特別の形に書いておこうということである．

話を，1 実変数 x に依存する 1 実関数 $u(x)$ に限ることとする．このとき，

$$I \equiv \int_a^b \mathrm{d}x f(x)\{(u'(x))^2 + \alpha(x)u(x)u'(x) + \beta(x)u^2(x)\} \tag{3.1}$$

に停留値をとらせるために，この量の $u(x)$ についての変分が 0 になることを要求する．ここで，$f(x)$, $\alpha(x)$ や $\beta(x)$ は，ある与えられた実関数で，必要なだけ微分できるとする．$'$ は，x に関する微分である．式 (3.1) の変分を 0 とおき，Euler-Lagrange の方程式をたてると，

$$\begin{aligned}&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\{2f(x)u'(x) + f(x)\alpha(x)u(x)\}\\ &-\{f(x)\alpha(x)u'(x) + 2f(x)\beta(x)u(x)\}\\ &= 2[f(x)u''(x) + f'(x)u'(x) + g(x)u(x)] = 0\end{aligned} \tag{3.2}$$

ただし，

$$g(x) \equiv \left\{\frac{1}{2}\left(f'(x)\alpha(x) + f(x)\alpha'(x)\right) - f(x)\beta(x)\right\} \tag{3.3}$$

である．式 (3.2) は，自己随伴型微分方程式である．そして，$u(x)$ がこれを満たすとき，式 (3.1) は停留値をとる．

さて，そこでたとえば Hermite 多項式の満たす微分方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 2\gamma^2 x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + 2\gamma^2 n\right]H_n(\gamma x) = 0 \qquad n = 0, 1, 2, \cdots \tag{3.4}$$

と，式 (3.2) を比較すると，

$$f(x) \equiv \exp(-\gamma^2 x^2) \tag{3.5a}$$

$$\beta(x) \equiv \frac{1}{2}(\alpha'(x) - 2\gamma^2 x\alpha(x)) - 2\gamma^2 n \tag{3.5b}$$

が得られる．したがって，

$$\begin{aligned}I_H \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \exp\left(-\gamma^2 x^2\right)\Big[&(u'(x))^2 + \alpha(x)u(x)u'(x)\\ &+\left\{\frac{1}{2}\alpha'(x) - \gamma^2 x\alpha(x) - 2\gamma^2 n\right\}u^2(x)\Big]\end{aligned} \tag{3.6}$$

の停留値は，Hermite の多項式で与えられることがわかる．ここで $\alpha(x)$ という関数は，全く任意である．これは，次に例を挙げるように，問題を解くために都合のよいように勝手に選べばよい．

[例 1]

そこで例として固有値問題

$$\frac{1}{2}\left\{-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\omega^2x^2\right\}\psi(x)=E\psi(x) \tag{3.7}$$

を，解かずして解くことを考えよう．式 (3.7) という固有値問題は，

$$I\equiv\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\left\{\left(\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\right)^2+\omega^2x^2\psi^2(x)-2E\psi^2(x)\right\} \tag{3.8}$$

に停留値をとらせるということと同じである．事実式(3.8)から Euler-Lagrange の方程式を作ってみると，式 (3.7) に一致する．そこで，式 (3.8) を (3.6) の形に変形できないかを考える．そのために，

$$\psi(x)\equiv\exp\left(-\frac{1}{2}\gamma^2x^2\right)u(x) \tag{3.9}$$

とおくと（まだ γ は何かわからない），

$$I=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\exp(-\gamma^2x^2)\Big[(u'(x))^2-2\gamma^2xu(x)u'(x)$$
$$+\left\{(\gamma^4+\omega^2)x^2-2E\right\}u^2(x)\Big] \tag{3.10}$$

が得られる．この式と式 (3.6) を比べてみると，

$$\alpha(x)=-2\gamma^2x \tag{3.11a}$$

$$\alpha'(x)=-2\gamma^2 \tag{3.11b}$$

ととり，かつ，

$$\gamma^2=\omega \tag{3.12}$$

と決めると，

$$E=\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)\quad n=0,1,2,\cdots \tag{3.13}$$

であれば，I が停留値をとり，したがって固有値問題 (3.7) が解けたことになる．そして固有関数は，

$$\psi_n(x)\propto\exp\left(-\frac{1}{2}\omega x^2\right)H_n(\sqrt{\omega}x) \tag{3.14}$$

である． H_n はいうまでもなく n 次の Hermite 多項式である．

ここでは，固有値問題 (3.7) の物理的背景を説明しなかったが，固有値 (3.13) が，前に求めた調和振動子のそれ，IX 章の式 (3.1)，(3.8) などに一致していることに気がつかれたであろう．ここでは，まともに問題を解かないで，“他人の褌で相撲をとる” ような手を使って固有値問題の解を見つけた．他人の褌でもっと相撲をとるためには，他人の褌を並べて表にしておくと便利である．

§4.　量子力学に出てくる微分方程式

量子力学で素直な固有値問題を解こうとするとき出てくる 2，3 の微分方程式と，それらの解について，簡単に復習しておこう．実際に解を見つける仕事は，その道の成書を参照していただくことにして，ここでは，それらを§3 の式 (3.1) の形に準備することを主眼にする．なぜ，微分方程式に頼らずに変分法を使おうとするのかというと，それは次のような利点があるからである．通常物理に出てくる微分方程式は 2 階の微分方程式である．変数変換をするとき，2 階の微分はたいへんやっかいである．変分法では，いままでみてきたように，停留値をとる量は，1 階の微分しか含んでいない．したがって，微分方程式に直接立ち向かうよりも変分法に頼るほうが，一般には計算が楽なのである．しかも，以下にでてくる変分の式 (4.5) や (4.23) を眺めていると，どんな変換が有効であるか，だんだんとわかってくるようになる．

I.　Hermite の多項式

これは§3 ですでに扱ったが，Hermite 多項式 $H_n(x)$ は，微分方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x^2}-2\gamma^2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+2\gamma^2n\right]H_n(\gamma x)=0 \qquad n=0,1,2,\cdots \tag{4.1}$$

を満たす．

$$\phi_n(x)\equiv\frac{1}{\sqrt{2^n n!\sqrt{\pi}}}\exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right)H_n(x) \tag{4.2}$$

を作ると，これは規格化直交条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ \phi_n(x)\phi_m(x)=\delta_{n,m} \tag{4.3}$$

を満たす．

Hermite 多項式を，

$$\exp\left(-\lambda^2+2\lambda x\right)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}H_n(x) \tag{4.4}$$

で定義することもある．この式の左辺を，Hermite 多項式の母関数という．これはまた，

$$\exp-(\lambda-x)^2=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}H_n(x)\exp(-x^2) \tag{4.4'}$$

と書いておいてもよい．この式の右辺の各項は，$x\to\pm\infty$ で常に 0 になる．

量

$$I\ (\text{Hermite})\equiv\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\exp(-\gamma^2x^2)\Big[(u'(x))^2+\alpha(x)u(x)u'(x)$$
$$+\Big\{\frac{1}{2}\alpha'(x)-\gamma^2x\alpha(x)-2\gamma^2n\Big\}u^2(x)\Big] \tag{4.5}$$

は $\alpha(x)$ が何であっても，$u(x)$ が Hermite の多項式であるとき，停留値をとる．$n=0,1,2,\cdots$ である．

2. Legendre の多項式

微分方程式

$$\Big[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\ell(\ell+1)\Big]P_\ell(x)=0$$
$$\ell=0,1,2,\cdots\qquad |x|\leq 1 \tag{4.6}$$

を満たす解のうち，$|x|=1$ で発散しない解を第 1 種の Legendre 多項式という．規格化直交条件

$$\int_{-1}^{1}\mathrm{d}xP_\ell(x)P_m(x)=\frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,m} \tag{4.7}$$

を満たすものがよく使われる．これはすでに VIII 章の散乱の議論でみたところである．母関数は，

$$\{1-2\lambda x+\lambda^2\}^{-\frac{1}{2}}=\sum_{\ell=0}^{\infty}\lambda^\ell P_\ell(x) \tag{4.8}$$

である．この場合にも，Hermite の多項式のときと同じようにして，

$$I\ (\text{Legendre})\equiv\int_{-1}^{1}\mathrm{d}x(1-x^2)$$
$$\times\Big[(u'(x))^2+\alpha(x)u(x)u'(x)$$
$$+\Big\{\frac{1}{2}\alpha'(x)-\frac{x}{1-x^2}\alpha(x)-\frac{\ell(\ell+1)}{2(1-x^2)}\Big\}u^2(x)\Big] \tag{4.9}$$

を作ると，$\alpha(x)$ が何であっても，これに停留値をもたせるのは Legendre の多項式である．

Legendre の多項式と深い関係にある，随伴 Legendre 多項式というのも，

物理学にはよく出てくる．それは，

$$P_\ell^m(x) \equiv (1-x^2)^{\frac{1}{2}|m|} \frac{\mathrm{d}^{|m|}}{\mathrm{d}x^{|m|}} P_\ell(x) = 0 \tag{4.10}$$

で定義される．この多項式が満たす微分方程式は，

$$\left[(1-x^2)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - 2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \left\{\ell(\ell+1) - \frac{m^2}{1-x^2}\right\}\right] P_\ell^m(x) = 0 \tag{4.11}$$

で，直交関係

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x P_\ell^m(x) P_{\ell'}^{m'}(x) = \frac{2}{2\ell+1}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'} \tag{4.12}$$

を満たすものがよく使われる．停留値をとるのは，

$$\begin{aligned} I(\text{A Legendre}) = &\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x(1-x^2) \\ &\times\left[\Big(u'(x)\Big)^2 + \alpha(x)u(x)u'(x)\right. \\ &\left.+\left\{\frac{1}{2}\alpha'(x) - \frac{x}{1-x^2}\alpha(x) - \frac{\ell(\ell+1)}{1-x^2} + \frac{m^2}{(1-x^2)^2}\right\}u^2(x)\right] \end{aligned} \tag{4.13}$$

となり，やや複雑である．

変数変換の容易であることを示すために，たとえば，

$$x = \cos\theta \tag{4.14}$$

とすると，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta} \tag{4.15}$$

であり，2 階微分は必要ない．すると式 (4.13) は，

$$\begin{aligned} I\ (\text{A Legendre}) = &\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \sin\theta \left[\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\theta}\right)^2 - \alpha\sin\theta u\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}\theta}\right. \\ &\left.-\left\{\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}\alpha}{\mathrm{d}\theta}\sin\theta + \alpha\cos\theta + \ell(\ell+1) - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right\}u^2\right] \end{aligned} \tag{4.13'}$$

となる．

VII 章に出てきた角運動量の固有関数は，実は，

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) \equiv (-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{4.16}$$

であった．これは球関数とよばれ，微分方程式

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - \ell(\ell+1)\right]Y_\ell^m(\theta,\ \phi) = 0 \tag{4.17a}$$

および

$$\left[i\frac{\partial}{\partial\phi}+m\right]Y_\ell^m(\theta,\ \phi)=0$$
$$m=-\ell,-\ell+1,\cdots,\ell-1,\ell \tag{4.17b}$$

を満たす．規格化直交条件は，

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\, Y_{\ell'}^{m'*}(\theta,\phi)Y_\ell^m(\theta,\phi)=\delta_{\ell,\ell'}\delta_{m,m'} \tag{4.18}$$

となる．

3. Laguerre の多項式

量子力学において，水素原子のエネルギー準位を求めるときに出てくるのが，Laguerre の多項式である．基本になる微分方程式は，

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\left(\frac{1}{x}-\gamma\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+n\frac{\gamma}{x}\right]L_n(\gamma x)=0$$
$$n=0,1,2,\cdots \tag{4.19}$$

だが，これを特別の場合として含む Laguerre の倍多項式の方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\left(\frac{1+m}{x}-\gamma\right)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+(n-m)\frac{\gamma}{x}\right]L_n^m(\gamma x)=0$$
$$n=0,1,2,\cdots\qquad n\geq m \tag{4.19'}$$

を考えるほうが便利である．

この多項式の母関数は，

$$\frac{(-\lambda)^m}{(1-\lambda)^{m+1}}\exp\left\{-\frac{\lambda}{1-\lambda}x\right\}=\sum_{n=m}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}L_n^m(x) \tag{4.20}$$

で，直交関係は，

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^m e^{-x}L_n^m(x)L_{n'}^m(x)=\frac{(n!)^3}{(n-m)!}\delta_{n,n'} \tag{4.21}$$

である．このとき，漸近形は，

$$L_n^m(x)\to\frac{(n+m)!}{n!}(-x)^n\quad |x|\to 0 \tag{4.22}$$

で与えられる．

Laguerre の倍多項式は，任意の $\alpha(x)$ に対して，

$$I\text{ (B Legendre)}\equiv\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{m+1}e^{-\gamma x}\Big[(u'(x))^2+\alpha(x)u(x)u'(x)$$
$$+\left\{\frac{1}{2}\alpha'(x)+\frac{1}{2}\alpha(x)\left(\frac{1+m}{x}-\gamma\right)-\frac{\gamma(n-m)}{x}\right\}u^2(x)\Big] \tag{4.23}$$

を停留値にする．特に，

$$\alpha(x) = 0 \tag{4.24}$$

と選ぶと,

$$I = \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{m+1} e^{-\gamma x} \left[(u'(x))^2 - \gamma \frac{n-m}{x} u^2(x) \right] \tag{4.25}$$

となる. 水素原子のエネルギー準位の計算には,

$$\alpha(x) = \frac{2\ell}{x} - \gamma \quad m = 2\ell + 1 \tag{4.26}$$

とおいたときの

$$I = \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{m+1} e^{-\gamma x} \left[u'^2 + \left(\frac{2\ell}{x} - \gamma \right) uu' + \left\{ \frac{1}{2}\gamma^2 - \gamma \frac{n}{x} + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2} \right\} u^2 \right] \tag{4.27}$$

が役に立つ. その計算は後で考える.

4. Tschebyscheff 多項式

Tschebyscheff の方程式

$$\left[(1-x^2) \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + n^2 \right] u(x) = 0 \tag{4.28}$$

には, 2 組の互いに独立な解があり, それぞれ $T_n(x), U_n(x)$ $(n = 0, 1, 2, \cdots)$ と表す.

$$T_n(x) = n \text{ 次の多項式}$$

$$\frac{U_{n+1}(x)}{\sqrt{1-x^2}} \equiv Q_n(x) = n \text{ 次の多項式}$$

で, $T_n(x)$ と $Q_n(x)$ を, それぞれ第 1 種, 第 2 種の Tschebyscheff 多項式とよぶ. 母関数は,

$$\frac{1-\lambda x}{1-2\lambda x+\lambda^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n T_n(x) \qquad |\lambda| \leq 1 \tag{4.29a}$$

$$\frac{1}{1-2\lambda x+\lambda^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n Q_n(x) \qquad |\lambda| \leq 1 \tag{4.29b}$$

である. また, 特別な点における値は,

$$T_n(1) = 1 \qquad T_n(-1) = (-1)^n \tag{4.30a}$$

$$T_{2n}(0) = (-1)^n \qquad T_{2n+1}(0) = 0 \tag{4.30b}$$

$$U_n(1) = 0 \qquad U_n(-1) = 0 \tag{4.31a}$$

$$U_{2n}(0) = 0 \qquad U_{2n+1}(0) = (-1)^n \tag{4.31b}$$

で，直交条件は，

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} T_n(x)T_m(x) = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ \dfrac{1}{2}\pi & n = m \neq 0 \\ \pi & n = m = 0 \end{cases} \tag{4.32}$$

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} U_n(x)U_m(x) = \begin{cases} 0 & n \neq m \\ \dfrac{1}{2}\pi & n = m \neq 0 \\ 0 & n = m = 0 \end{cases} \tag{4.33}$$

で与えられる．

$$T_n(x) = \frac{1}{2}\Big[(x + i\sqrt{1-x^2})^n + (x - i\sqrt{1-x^2})^n\Big] \tag{4.34}$$

$$U_n(x) = \frac{1}{2}\Big[(x + i\sqrt{1-x^2})^n - (x - i\sqrt{1-x^2})^n\Big] \tag{4.35}$$

という表現もときどき使われる．

Tschebyscheff の多項式で，停留値をとるのは，

$$I\ (\text{Tschebyscheff}) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \sqrt{1-x^2}\Big[(u'(x))^2 + \alpha(x)u(x)u'(x) + \Big\{\frac{1}{2}(\alpha'(x) - \frac{x}{1-x^2}\alpha(x)) - \frac{n^2}{\sqrt{1-x^2}}\Big\}u^2(x)\Big] \tag{4.36}$$

$\alpha(x)$ はここでも全く任意である．

5. Bessel 関数

微分方程式

$$\Big[x^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + (\gamma^2x^2 - n^2)\Big]u(\gamma x) = 0 \tag{4.37}$$

には，通常 $J_n(\gamma x), N_n(\gamma x)$ と書かれる互いに独立な 2 種類の解があり，これらは Bessel 関数とよばれる．母関数は，n が整数の場合，

$$\exp\Big[\frac{x}{2}(\lambda - \frac{1}{\lambda})\Big] = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda^n J_n(x) \tag{4.38}$$

である．

物理によく出てくるのは，n が半整数のとき $n = \ell + 1/2$ で，

$$j_\ell(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(x) \tag{4.39}$$

$$n_\ell(x) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2x}}N_{\ell+\frac{1}{2}}(x) \tag{4.40}$$

を，それぞれ第 1 種，第 2 種の球 Bessel 関数とよぶ．これらは微分方程式

$$\left[x^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+2x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}+\left\{\gamma^2x^2-\ell(\ell+1)\right\}\right]u(\gamma x)=0 \quad \ell=0,1,2,\cdots \tag{4.41}$$

を満たす．

球 Bessel 関数は，初等関数で表現でき，

$$j_\ell(x)=(-1)^\ell(2x)^\ell\frac{\mathrm{d}^\ell}{\mathrm{d}(x^2)^\ell}\left(\frac{\sin x}{x}\right) \tag{4.42}$$

$$n_\ell(x)=(-1)^{\ell+1}(2x)^\ell\frac{\mathrm{d}^\ell}{\mathrm{d}(x^2)^\ell}\left(\frac{\cos x}{x}\right) \tag{4.43}$$

である．漸近形は $x\to 0$ で，

$$j_\ell(x)\to\frac{x^\ell}{(2\ell+1)!!} \tag{4.42$'$}$$

$$n_\ell(x)\to-\frac{(2\ell-1)!!}{x^{\ell+1}} \tag{4.43$'$}$$

$x\to\infty$ で，

$$j_\ell(x)\to\frac{1}{x}\sin\left\{x-\frac{1}{2}\ell\pi\right\} \tag{4.42$''$}$$

$$n_n(x)\to-\frac{1}{x}\cos\left\{x-\frac{1}{2}\ell\pi\right\} \tag{4.43$''$}$$

である．これらは VIII 章の散乱問題で使った．

$$I\ (\text{Spherical Bessel})\equiv\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^2\Big[(u'(x))^2+\alpha(x)u(x)u'(x)$$
$$+\left\{\frac{1}{2}\alpha'(x)+\frac{\alpha(x)}{x}+\left(\frac{\ell(\ell+1)}{x^2}-1\right)\right\}u^2(x)\Big] \tag{4.44}$$

は，$u(x)$ が球 Bessel 関数のとき停留値をとる．

§ 5.　水素原子のエネルギー準位

§ 4 では，ある種の微分方程式を，大急ぎで変分の形に直した．数学的に厳密な，解の存在条件などはいちいち書かなかったが，そのような点に興味があれば，寺沢寛一 “自然科学者のための数学概論” （岩波書店，1954）などを参照されたい．

ここで，量子力学における水素原子のエネルギー準位を求めるという問題

を，変分法を用いて考えてみよう．

この問題は，

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2-\frac{Ze^2}{r}\right]\psi(x)=E\psi(x) \tag{5.1}$$

という固有値問題を解き，固有値 E を求めることである．ここで μ は，原子核の質量 M と電子の質量 m の換算質量で，

$$\frac{1}{\mu}=\frac{1}{M}+\frac{1}{m} \tag{5.2}$$

で与えられる．Ze は原子核の電荷で，電子のそれは $-e$ である．

固有値問題 (5.1) は，

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3x\Big[\nabla\psi^*(x)\,\nabla\psi(x)-\frac{2\mu}{\hbar^2}(E+\frac{Ze^2}{r})\psi^*(x)\psi(x) \tag{5.3}$$

$$=\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{2\pi}\mathrm{d}r\,r^2\Big[\frac{\partial\,\psi^*}{\partial\,r}\frac{\partial\,\psi}{\partial\,r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial\,\psi^*}{\partial\,\theta}\frac{\partial\,\psi}{\partial\,\theta}$$

$$+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial\,\psi^*}{\partial\,\phi}\frac{\partial\,\psi}{\partial\,\phi}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)\psi^*\psi\Big] \tag{5.3'}$$

の停留値を求めることと同等である．事実 (5.3) の Euler-Lagrange 方程式を作ってみると，式 (5.1) が得られる．式 (5.3) から (5.3′) へいくには，極座標に直し，

$$\frac{\partial}{\partial\,x}=\sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\,r}+\frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\,\theta}-\frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\,\phi} \tag{5.4a}$$

$$\frac{\partial}{\partial\,y}=\sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\,r}+\frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\,\theta}+\frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\,\phi} \tag{5.4b}$$

$$\frac{\partial}{\partial\,z}=\cos\theta\frac{\partial}{\partial\,r}-\frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\,\theta} \tag{5.4c}$$

を用いればよい．2 階微分は必要ない．

いま，変数 r と θ,ϕ とが分離し，

$$\psi=R(r)Y(\theta,\phi) \tag{5.5}$$

という形に書くことができたとすると，式 (5.3′) は，

$$I=\int_0^{\pi}\mathrm{d}\theta\sin\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi\int_0^{\infty}\mathrm{d}r\,r^2\Big[\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}|Y|^2+\frac{1}{r^2}R^2\frac{\partial\,Y^*}{\partial\,\theta}\frac{\partial\,Y}{\partial\,\theta}$$

$$+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}R^2\frac{\partial\,Y^*}{\partial\,\phi}\frac{\partial\,Y}{\partial\,\phi}-\frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E+\frac{Ze^2}{r}\right)R^2|Y|^2\Big] \tag{5.6}$$

となる．

演習問題 11 によると，Y を，

$$\int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi Y_\ell^{m^*}(\theta,\ \phi) Y_\ell^m(\theta,\ \phi) = 1 \tag{5.7}$$

と規格化したとき，I は，

$$I = \int_0^{\infty} \mathrm{d}r\, r^2 \Big[\Big(\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\Big)^2 - \frac{2\mu}{\hbar^2}\Big(E + \frac{Ze^2}{r}\Big)R^2 + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R^2\Big] \tag{5.8}$$

$$= \frac{Z}{a_0}\int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, x^2 \Big[\Big(\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}x}\Big)^2 + \Big(\lambda + \frac{2}{x} + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\Big)R^2\Big] \tag{5.8$'$}$$

となる．式 (5.8) から (5.8′) へいくには，スケールを変えて，

$$x \equiv \frac{Ze^2\mu}{\hbar^2} r \equiv \frac{Z}{a_0} r \tag{5.9a}$$

$$\lambda \equiv -\frac{a_0^2}{Z^2}\frac{2\mu}{\hbar^2}E \tag{5.9b}$$

とおいただけである．

式 (5.8) は，ほとんど前の式 (4.27) の形に近いが，まだ完全には同じではない．もう一息である．そこで，

$$R = x^\ell \exp\Big(-\frac{1}{2}\gamma x\Big)u(x) \tag{5.10}$$

とおくと，

$$\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}x} = x^\ell \exp\Big(-\frac{1}{2}\gamma x\Big)\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\ell}{x} - \frac{1}{2}\gamma\Big)u \tag{5.10$'$}$$

したがって，

$$I = \frac{Z}{a_0}\int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, x^{2\ell+2}\exp(-\gamma x)\Big[\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\ell}{x} - \frac{\gamma}{2}\Big)u\Big(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\ell}{x} - \frac{\gamma}{2}\Big)u + \Big(\lambda - \frac{2}{x} + \frac{\ell(\ell+1)}{x^2}\Big)u^2\Big]$$

$$= \frac{Z}{a_0}\int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, x^{2\ell+2}\exp(-\gamma x)\Big[(u')^2 + \Big(\frac{2\ell}{x} - \gamma\Big)uu' + \Big\{\frac{1}{4}\gamma^2 + \lambda - (\gamma\ell + 2)\frac{1}{x} + \frac{2\ell^2+\ell}{x^2}\Big\}u^2\Big] \tag{5.11}$$

となり，

$$\gamma\ell + 2 = \gamma n \quad \therefore \quad \gamma = \frac{2}{n-\ell} \tag{5.12a}$$

$$\frac{1}{4}\gamma^2 + \lambda = \frac{1}{2}\gamma^2 \quad \therefore \quad \lambda = \Big(\frac{1}{n-\ell}\Big)^2 \tag{5.12b}$$

ととると，式 (4.27) の形になる．ここで $n = 1, 2, 3, \cdots$ である．そこで，$n-\ell$ をあらためて n と書くと，新しい n も，

$$n = 1, 2, 3, \cdots \tag{5.13}$$

をとり，それに対して，

$$\lambda = -\frac{a_0}{Z^2}\frac{2\mu}{\hbar^2}E = \frac{1}{n^2} \tag{5.14}$$

$$\therefore \quad E_n = -\frac{Z^2e^2}{2a_0^2}\frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{5.14$'$}$$

というよく知られた，水素原子のエネルギー準位が得られる．

固有関数のほうは，Laguerre の倍多項式で，式 (5.10) によって，

$$R(r) \propto \left(\frac{Z}{a_0}r\right)^{\ell} \exp\left(-\frac{1}{n}\frac{Z}{a_0}r\right) L_{n+\ell}^{2\ell+1}\left(\frac{Z}{a_0}r\right) \tag{5.15}$$

となる．比例定数は規格化条件によって決まる．固有関数は，指数関数のために，r が大きなところでうまい具合に 0 に近づく．これは，電子が核から遠いところに見いだされる確率が少ないことを表している．水素原子では，電子は核の近くに束縛されているはずだからである（核のまわりを回っているかどうかはここでは直接見えないが，角運動量 ℓ がはいっているから，“回っている” 予想はつく）．

水素原子の場合は，Laguerre のおかげで正確に問題が解けた．こんな幸運はめったになく，たいていの問題では，なんらかの近似を使わなければならない．変分法を用いて固有値問題を近似的に解くことについては，§7 で考える．

変分法を使って固有値問題を解く方法は，前にもいったように，変数変換がやさしいという利点がある．では，どのような変換をすればよいかという問題は，もちろん扱っている物理系の対称性などが目安になる．たとえば，中心力ポテンシャルを扱う問題では，一般に座標 x, y, z よりも，球面極座標 r, θ, ϕ のほうが便利である．

そのほか，束縛状態を取り扱うなら，固有関数は遠方で 0 にならなければならないから， $\exp(-i\gamma r)$ の指数関数や $\exp(-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2)$ の Gauss 関数などの因子を分離することになる．式 (4.5) の Hermite の多項式や，式 (4.23) の Laguerre の多項式の変分の式を見ながら，結果ができるだけ簡単になるように工夫しなければならない．

§6.　平衡系の統計力学における変分法

物質の巨視的性質を微視的な観点から説明しようという課題では，平衡系に関するかぎり，現代の統計力学が十分よい答えを与えるといってよいと思う．巨視的な量としては，系のもつエネルギー，体積，粒子数などのような示量的な量と，圧力，温度，化学ポテンシャルのような示強的な量がある．このうち3個を指定すると，熱力学的関数（エントロピーとか Helmholtz の自由エネルギー）が定まり，それからいろいろな物理量が計算できる．これは，巨視的な古典熱力学の立場である．微視的な立場の統計力学では，3個の巨視的な量を与えたとき，微視的な確率分布関数が定まる．確率分布関数から，物理量の平均値が計算できる．実用的には熱力学と統計力学とを混然と併用することが多い（これが統計力学という学問を勉強するとき，むずかしいと感じるおもな原因ではないだろうか）．

巨視的な量を3個与えたとき，その巨視的状態を与える微視的状態は，ほとんど数え切れないくらい多数ある．それらの微視的状態が，どれだけの割合で，与えられた平衡的巨視的状態に寄与しているであろうか．それを示すのが，確率分布関数である．

では，確率分布関数はどのようにして決めるのか．それを決めるためには何か指導原理がいる．その原理とは“無知の原理”である．無知の程度を示す量として，以下に示す“S”という量を導入し，それを最大にするように決める．そのときの“S”の最大値 S が，熱力学におけるエントロピーである．「“S”を最大にする」というところで，変分法がものをいう．

まず，上にいったことを数学的に表現しなければならない．微視的状態を指定するためには，通常，位置座標と運動量で張られる位相空間を用いる．N 粒子系ならば，$3N+3N=6N$ 次元の位相空間を考え，その中の1点を，簡単のため Γ とすると，それによって各粒子がどんな位置をとり，どんな運動量をもっているかがわかる．Γ は，つまり微視的状態を示す量である．た

とえば巨視的に，系のもつエネルギー E，全粒子数 N，体積 V が与えられたとき，微視的状態 Γ がその巨視的状態に寄与する確率を $f(\Gamma)$ と書く．$f(\Gamma)$ は確率だから，全体の微視的状態についてたしあわせると 1 になっているはずで，

$$\sum_{\Gamma} f(\Gamma) = 1 \tag{6.1}$$

である（つまり，Γ はサイコロの目にあたる）．この確率分布関数 $f(\Gamma)$ は，系の力学的構造にもよるだろうし，われわれの無知の程度にもよる．力学的構造を表現するには，いままで何度もいったように，運動方程式などは不十分で，たった 1 つの量 Lagrangian か Hamiltonian を使うのがいちばんよい．

無知の程度を示す量として，

$$\text{“}S\text{”} \equiv -k_B \sum_{\Gamma} f(\Gamma) \ln f(\Gamma) \tag{6.2}$$

を導入する（k_B はある定数．統計力学では k_B は Boltzmann の定数）．$f(\Gamma)$ は確率だから，常に 1 より小さい正数，したがって式 (6.2) は正の量である．もしわれわれが，どの微視的状態に系があるのかを知っていると，たとえばたった 1 つの微視的状態に系があり，すべての他の状態にある確率が 0 ならば，容易にわかるように，式 (6.2) は 0 になる．寄与する微視的状態の数が増えるに従ってわれわれの無知の度合いは高くなり，式 (6.2) は増えていく．どの微視的状態が寄与するのか全然わからなくなったとき，つまりすべての微視的状態が等しく寄与するとき，式 (6.2) は最大になる．

以上のことを変分法で取り扱うためには，式 (6.1) の条件を考慮するために，Lagrange の未定係数 λ を使って，

$$\text{“}S\text{”} \equiv -k_B \left[\sum_{\Gamma} f(\Gamma) \ln f(\Gamma) + \lambda\left\{\sum_{\Gamma} f(\Gamma) - 1\right\}\right] \tag{6.2$'$}$$

と書き直し，それを最大にするように $f(\Gamma)$ を定める．両辺の変分をとると，

$$\delta\text{“}S\text{”} = -k_B\left[\sum_{\Gamma}(\ln f(\Gamma) + 1 + \lambda)\delta f(\Gamma)\right] - k_B\delta\lambda\left(\sum_{\Gamma} f(\Gamma) - 1\right) \tag{6.3}$$

“S” が最大値をとるのは，全く勝手な $\delta f(\Gamma)$ と $\delta\lambda$ に対して，式 (6.3) が 0 となるとき（必要条件）で，

$$\ln f(\Gamma) + 1 + \lambda = 0 \tag{6.4}$$

$$\sum_{\Gamma} f(\Gamma) = 1 \tag{6.4'}$$

したがって，式 (6.4) から，確率分布関数は，微視的状態によらず，

$$f(\Gamma) - \exp\{-(1+\lambda)\} \tag{6.5}$$

であることがわかる（完全無知状態）．

λ を決めるためには，式 (6.5) を (6.4′) に代入してやればよい．エネルギーが E と $E+\delta E$ の間にあり，体積 V，粒子数 N をもった微視的状態の数を $W(N,E,V,\delta E)$ とすると，式 (6.5) と (6.4′) から，

$$f(\Gamma) - \exp\{-(1+\lambda)\} = \frac{1}{W(N,E,V,\delta E)} \tag{6.6}$$

となる（サイコロの面の数が 6 個，したがって各面のもつ確率は全部等しく，1/6 であるのと全く同じ）．W は微視的状態の数で，全系の Hamiltonian が与えられていれば，原理的に計算できる量である．そして，そのときの "S" の最大値 S は，

$$S = -k_B \sum_{\Gamma} \frac{1}{W} \ln \frac{1}{W} = k_B \ln W(N,E,V,\delta E) \tag{6.7}$$

となる．これが，Boltzmann-Planck の，巨視的量と微視的量を結びつける画期的な関係式である．式 (6.7) から，熱力学の助けを借りて温度とか圧力などが計算できる．以上がいわゆる，小正準集合の理論である．

正準集合の理論も，全く同様に定式化することができる．ただしこの場合には，巨視的状態は，粒子数 N，エネルギー E，体積 V ではなく，粒子数 N，エネルギーの平均値 $\langle E\rangle_c$，体積 V を指定する．つまりこの場合には，式 (6.1) に加え，

$$\langle E\rangle_c = \sum_{\Gamma} E(\Gamma) f_c(\Gamma) \tag{6.8}$$

をも条件として，式 (6.2) を最大にする．すなわち，

$$\text{“}S\text{”} = -k_B \sum_{\Gamma} f_c(\Gamma) \ln f_c(\Gamma) - k_B\lambda\Big\{\sum_{\Gamma} f_c(\Gamma) - 1\Big\}$$
$$-k_B\beta\{\sum_{\Gamma} E(\Gamma) f_c(G) - \langle E\rangle_c\} \tag{6.9}$$

を最大にする．変分

$$\delta\text{ “}S\text{”} = -k_B \sum_{\Gamma} \delta f_c(\Gamma)\{\ln f_c(\Gamma) + 1 + \lambda + \beta E(\Gamma)\}$$
$$-k_B\delta\lambda\{\sum_{\Gamma} f_c(\Gamma) - 1\} - k_B\delta\beta\{\sum_{\Gamma} E(\Gamma) f_c(G) - \langle E\rangle_c\} \qquad (6.10)$$

を 0 とおくことにより,

$$\ln f_c(\Gamma) = -1 - \lambda - \beta E(\Gamma) \qquad (6.11a)$$
$$\sum_{\Gamma} f_c(\Gamma) = 1 \qquad (6.11b)$$
$$\sum_{\Gamma} E(\Gamma) f_c(\Gamma) = \langle E\rangle_c \qquad (6.11c)$$

が得られる．このとき式 (6.2) が最大値をとる．

$$\exp\{-(1+\lambda)\} \equiv \frac{1}{Z_c} \qquad (6.12)$$

とおくと，式 (6.11a) より，

$$f_c(\Gamma) = \frac{1}{Z_c}\exp\{-\beta E(\Gamma)\} \qquad (6.13)$$

かつ，式 (6.11b) より，

$$Z_c = \sum_{\Gamma} \exp\{-\beta E(\Gamma)\} \qquad (6.14)$$

が得られる．式 (6.11c) からは,

$$\langle E\rangle_c = \frac{1}{Z_c}\sum_{\Gamma} E(\Gamma)\exp\{-\beta E(\Gamma)\} = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z_c \qquad (6.15)$$

となり，温度の逆数 β とエネルギーの平均値との関係が得られる（通常は，β を先に与えられたものとして，エネルギーの平均値を計算するのに式 (6.15) を使う）．

$f_c(\Gamma)$ が式 (6.13) のように決まると，それを式 (6.9) に代入したとき，正準集合の理論におけるエントロピーは,

$$S_c = k_B\left\{1 - \beta\frac{\partial}{\partial\beta}\right\}\ln Z_c \qquad (6.16)$$

となる．

以上が正準集合の理論である．他の集合理論も同じだからこのあたりで止めておくが，最後に 2 つだけ注意しておくと：エントロピーを最大にするだけが能ではないということである．たとえば正準集合の理論において，Helmholtz の自由エネルギー

$$“F” = \sum_{\Gamma} f_c(\Gamma)\Big\{E(\Gamma) + \frac{1}{\beta}\ln f_c(\Gamma)\Big\} \tag{6.17}$$

を最少にするように確率分布関数を決めてもよい．これは演習問題にしておく．

非平衡系へ統計力学を拡張するには，式 (6.2) のような，時間に依存しない確率分布関数を考えるだけではたりないことは明らかである．確率分布関数の時間的変化を，変分原理に折り込まなければならない．それには何か物理的な原理が必要であるが，いまのところ万人が納得するようなものは提出されていない．

§7.　近似方法としての変分法

正確に解くことができる固有値問題は，数が限られている．そこで，変分法を，近似解を求めるために使うことを考えよう．話を具体的にするために，§3 で扱った調和振動子の固有値問題 (3.8)

$$I \equiv \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\Big\{\Big(\frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x}\Big)^2 + \omega^2 x^2 \psi^2(x) - 2E\psi^2(x)\Big\} + E \tag{7.1}$$

に戻ろう．ただし式 (7.1) では，右辺に E が加えてある．これは意味深長である．この項は，実は関数 $\psi(x)$ の規格化を正しく考慮する役割をする．それをみるためには，E を Lagrange の未定係数と考えて，式 (7.1) の E による変分を 0 とおいてやればよい．§3 でみたように，この量の ψ についての変分を 0 とおくと，もとの固有値問題 (3.7) が再現される．そして，I の停留値は，このとき E となる．

この場合は正確な解がわかっているが，いまはそれを知らないとしよう．あてずっぽうに，

$$\psi_0(x) \equiv A\exp\Big(-\frac{1}{2}\gamma^2 x^2\Big) \tag{7.2}$$

とおき，これを式 (7.1) に代入して，I が停留値をとるように γ を決めてみる．I は代入の結果，

$$I = \frac{1}{2}A^2\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\exp(-\gamma^2 x^2)\Big\{(\gamma^4 + \omega^2)x^2 - 2E\Big\} + E \tag{7.3}$$

となるから，積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \exp(-\gamma^2 x^2) = \frac{\sqrt{\pi}}{\gamma} \tag{7.4a}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, x^2 \exp(-\gamma^2 x^2) = \frac{1}{2\gamma^2} \frac{\sqrt{\pi}}{\gamma} \tag{7.4b}$$

を使うと，

$$I = \frac{1}{2} A^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\gamma} \left\{ \frac{1}{2\gamma^2} (\gamma^4 + \omega^2) - 2E \right\} + E \tag{7.5}$$

が得られる．これが停留値（この場合は最小値）をとるのは，

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ A^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{4\gamma} \left\{ \frac{1}{\gamma^2} (\gamma^4 + \omega^2) - 4E \right\} = 0 \tag{7.6a}$$

$$\frac{\partial\ I}{\partial \gamma} = A^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\gamma^2} \left\{ \frac{1}{2} (\gamma^2 - \frac{3\omega}{\gamma^2}) + 2E \right\} = 0 \tag{7.6b}$$

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ E} = -A^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\gamma} + 1 = 0 \tag{7.6c}$$

が満たされるときである． A^2 は式 (7.6c) により 0 ではないから，

$$\gamma^2 = \omega \tag{7.7}$$

$$E = \frac{1}{2}\omega \tag{7.8}$$

と決まる．式 (7.6c) から，あてずっぽうの関数 (7.2) を規格化する A^2 は決まり，

$$A^2 = \sqrt{\frac{\omega}{\pi}} \tag{7.9}$$

となる．

ここで決まったエネルギー (7.8) は，正しいエネルギー (3.13) の $n = 0$ とおいたものである．そしてこの固有値をもつ固有関数は，上の議論によると，

$$\psi_0(x) = \left(\frac{\omega}{\pi} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2} \gamma^2 x^2 \right) \tag{7.10}$$

で，これも式 (3.14) の $n = 0$ の場合に一致している．

ここでやったことを復習すると，次のようになる．もとの固有値問題は，式 (7.1) の変分を 0 とおくことと同等である．そこで，2 つの未知のパラメーター A と γ をもった，あてずっぽうの関数（これを “試し関数” とよぶ）式 (7.2) を仮定し，I に代入して，まずさきに積分を実行し，I をパラメーター A と γ の関数として表現する．その関数 (7.5) をパラメーター A と γ で微

分したものを 0 とおくと，式 (7.7)，(7.8) のように，固有関数と固有値が決まる．E で変分した結果は，試し関数を正しく規格化する．

つまり，いまやったことは，全く任意の変分を考えるかわりに，関数を式 (7.2) の型に制限してから変分をとったことになる．この場合，出発点にとった試し関数 (7.2) が，幸いにもよいものであったために，正確な解と一致するような結果が得られた．また，試し関数として積分が遂行できたので，上のような計算が可能であった．

もし出発点として，少々感が悪くて，式 (7.1) ではなく，

$$\psi_0^x(x) = A\exp\left(-\frac{1}{2}\gamma|x|\right) \tag{7.11}$$

をとり，これを式 (7.1) に代入したとすると，

$$I = A^2\int_0^\infty \mathrm{d}x\ \exp(-\gamma x)\left\{\omega^2x^2 + \frac{1}{4}\gamma^2 - 2E\right\} + E \tag{7.12}$$

となる．この場合にも積分は実行できて，

$$= \frac{A^2}{\gamma}\left\{\frac{2\omega^2}{\gamma^2} + \frac{\gamma^2}{4} - 2E\right\} + E \tag{7.12$'$}$$

が得られる．したがって，I の停留値を求めるために，

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ A^2} = \frac{1}{\gamma}\left\{\frac{2\omega^2}{\gamma^2} + \frac{\gamma^2}{4} - 2E\right\} = 0 \tag{7.13a}$$

$$\frac{\partial\ I}{\partial\,\gamma} = \frac{A^2}{\gamma^2}\left\{-\frac{6\omega^2}{\gamma^2} + \frac{\gamma^2}{4} + 2E\right\} = 0 \tag{7.13b}$$

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ E} = -2\frac{A^2}{\gamma} + 1 \tag{7.13c}$$

とおくと，

$$\gamma^2 = 2\sqrt{2}\omega \tag{7.14a}$$

$$E = \sqrt{2}\omega \tag{7.14b}$$

$$A^2 = \frac{\gamma}{2} \tag{7.14c}$$

と決まる．したがって，固有関数は，

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{\gamma}{2}}\exp\left(-\gamma|x|\right) \tag{7.15}$$

となる．これが，近似的固有値 (7.14b) に属する近似的固有関数である．

E の固有値は，式 (7.8) よりもかなり高いところに出てきた．

このように，パラメーター表示を使って変分をとるやり方では，はじめに

採用した試し関数のよしあしによって，正しい固有値と固有関数が得られることもあるが，一般には固有値は，正しいものより高いところに出る．これは変分法の一般的性質で，証明可能である．その証明をしておくと:

もとの固有値が正確に解くことができ，固有関数 $u_n(x)$ が得られたとする (上の例では式 (3.14))．この完全規格化直交系で，試し関数を展開すると，

$$\psi_0(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n u_n(x) \tag{7.16}$$

である．これを式 (7.1) に代入すると，

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \sum_{n,m} c_n c_m \left\{ u_n' u_m' + (\omega^2 x^2 - 2E) u_n u_m \right\} + E \\ &= \frac{1}{2}\sum_{n,m} c_n c_m (2E_n - 2E)\delta_{n,m} + E \\ &= \sum_n c_n^2 (E_n - E) + E \end{aligned} \tag{7.17}$$

これが最小値をとるのは，まず，

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ E} = \sum_n c_n^2 - 1 = 0 \tag{7.18}$$

したがって，

$$E = \frac{\displaystyle\sum_m c_m^2 E_m}{\displaystyle\sum_n c_n^2} \geq \frac{\displaystyle\sum_m c_m^2 E_0}{\displaystyle\sum_n c_n^2} = E_0 \tag{7.19}$$

のときである．したがって，変分で決められた E は，正しい最低固有値 E_0 よりも必ず上に出る．最低固有値が得られるのは，偶然に，

$$\psi_0(x) = u_0(x) \tag{7.20}$$

であるときに限られる．

試し関数は勝手なものでよいが，あまりとんでもないものを選ぶと，I の積分ができない．したがって，試し関数は，

(1) 物理的条件（境界条件など）を満たしていること

(2) I の積分が実行できること

を基準にして選ばなければならない．

変分法は，さらに高いレベルの固有値を決めるのにも使うことができる．基底状態の試し関数 $\psi_0(x)$ が決まったならば，次にそれと直交する試し関数 $\psi_1(x)$ を仮定し，また I に代入して同じ操作をくり返せばよい．

上の調和振動子の例では，式 (7.2) の次に，

$$\psi_1(x) = Bx\exp\left(-\frac{1}{2}\gamma^2x^2\right) \tag{7.21}$$

とおき，同じようにして B と γ を決めてみると，下から 2 番目のエネルギー準位と固有関数が得られる（演習問題参照）．

この節では，調和振動子に例をとって話をしたが，この手法はもっと複雑な場合にももちろん応用できる．ただし，この手法にも大きな弱点がある．それは，このやり方では，はじめにとる試し関数が，どれだけ正しいものからずれているかを評価するのがむずかしいことである．摂動論のように，組織的に近似を上げていくことができない．ただし，幸いなことに，もし試し関数と正しい固有関数のずれが ε のオーダーならば，得られる固有値の正しいものからのずれは，ε^2 のオーダーになるということを，証明することができる．したがって，固有値のほうの精度は，固有関数のそれに比べてかなり高い．このことを一般的に証明して，自ら納得しておくとよい（演習問題参照）．

統計力学における変分原理，特に Helmholtz の自由エネルギー (6.12) も近似計算に利用されることがたびたびある．(拙著，統計力学入門，p.223 参照)

変分法は，散乱問題において，位相のずれ $\delta_\ell(k)$ の近似計算にも利用される．これを最後に議論しておこう．

§8. 散乱問題における変分法

§6 で考えた統計力学の変分法では，確率分布関数の変化に対する停留値（この場合は最大値）がエントロピーになるような量 “S” を考え，それを最大にするように確率分布関数を定めた．いいかえると，エントロピーとは，“S” という量の最大値である．

§7では，I という量の停留値が，ちょうど固有値 E になるように固有関数を定めた．いいかえると，固有値 E は I の停留値である．

さて，散乱問題を変分法で取り扱うには，何をどのようにすればよいのか．ここで目標とするのは，ポテンシャル $U(r)$ が与えられたとき，散乱の位相をいかに計算するかという問題である．

そのために，§3の議論を思い出そう．散乱の位相はVIII章の式 (6.26b)

$$k\tan\delta_\ell(k) = -\int_0^\infty \mathrm{d}r\mathcal{S}_\ell(kr)U(r)\chi_\ell(k,r) \tag{8.1}$$

で与えられる．ここの，$\chi_\ell(k,r)$ はVIII章の方程式 (6.27)

$$\chi_\ell(k,r) = \mathcal{S}_\ell(kr) + \int_0^\infty \mathrm{d}r' G_\ell(r,r')U(r')\chi_\ell(k,r') \tag{8.2}$$

を満たす．$G_\ell(r,r')$ はGreen関数で，VIII章の式 (6.19) で与えられ，

$$G_\ell(r,r') = G_\ell(r',r) \tag{8.3}$$

という性質をもつ．いま簡単のため，

$$A \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}rU(r)\chi_\ell^2(k,r)$$
$$-\int_0^\infty \mathrm{d}r\int_0^\infty \mathrm{d}r'\chi_\ell(k,r)U(r)G_\ell(r,r')U(r')\chi_\ell(k,r') \tag{8.4a}$$

$$B \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}r\mathcal{S}_\ell(kr)U(r)\chi_\ell(k,r) \tag{8.4b}$$

とおき，

$$I_1 \equiv A - 2B \tag{8.5}$$

を考える．$\chi_\ell(k,r)$ についてこの量の変分をとると，式 (8.3) のために，

$$\begin{aligned}\delta I &= \delta A - 2\delta B\\ &= 2\int_0^\infty \mathrm{d}rU(r)[\chi_\ell(k,r) - \int_0^\infty \mathrm{d}r' G_\ell(r,r')U(r')\chi_\ell(k,r')\\ &\qquad -2\int_0^\infty \mathrm{d}r\mathcal{S}_\ell(kr)U(r)\delta\chi_\ell(k,r)\\ &= 2\int_0^\infty \mathrm{d}r\ U(r)[\chi_\ell(k,r) - \mathcal{S}_\ell(kr)\\ &\qquad -\int_0^\infty \mathrm{d}r' G_\ell(r,r')U(r')\chi_\ell(k,r')]\delta\chi_\ell(k,r)\end{aligned} \tag{8.6}$$

となる．ポテンシャル $U(r)$ は与えられた関数だから，これが任意の $\delta\chi_\ell(k,r)$

に対して 0 となるならば，$\chi_\ell(k,r)$ は方程式 (8.2) を満たしていなければならない．いいかえると，式 (8.5) の I_1 という量は，式 (8.2) が成り立つとき停留値をとる．式 (8.2) が成り立つならば，

$$A = B \tag{8.7}$$

したがって，I_1 の停留値は，

$$I_{\text{stationary}} = -B = k \tan \delta_\ell(k) \tag{8.8}$$

である．つまり I_1 は，方程式 (8.2) が成り立つとき停留値をとり，その停留値は式 (8.8) である．

したがって，式 (8.5) は，散乱問題における位相を求めるための変分法の式として利用することができる．つまり，適当なパラメーターを含む勝手な試し関数 $\chi_\ell(k,r)$ を仮定し，それを式 (8.5) に代入し，式 (8.5) の I_1 が停留値をとるようにパラメーターを決めると，その停留値が $k\tan\delta$ となるわけである．この場合 A と B の積分の中には，ポテンシャル $U(r)$ がはいっているから，試し関数を作るとき，ポテンシャルが消えてしまうような遠方のふるまいはきかない．

式 (8.5) の I_1 という量は，式 (8.2) が成り立つとき式 (8.8) によって $k\tan\delta$ になるが，式 (8.2) が成り立っていなくても一般に $k\tan\delta$ に似たようなものであろう．このことを近似式として使うこともできる．たとえば，式 (8.5) の $\chi_\ell(k,r)$ として $\mathcal{S}_\ell(kr)$ を代入し，式 (8.4a) 第 2 項を無視すると，

$$k \tan \delta_\ell(k) = -\int_0^\infty \mathrm{d}r\; U(r) \mathcal{S}_\ell^2(kr) \tag{8.9}$$

となる．これは VIII 章の Born 近似の式 (6.30) にほかならない．

式 (8.5) の左辺の停留値が $k\tan\delta$ になるという了解のもとに，式 (8.5) を単に，

$$k \tan \delta_\ell(k) = A - 2B \tag{8.10}$$

と書いてある本が多いが，ここでは概念的な問題をはっきりさせるために，あえてこの記号は避けて，

$$\text{“}k \tan \delta_\ell(k)\text{”} = A - 2B \tag{8.11}$$

と書くことにする．

散乱問題の変分法的表現は，式 (8.11) とは別の形に書くこともできる．いま，

$$I_2 = \frac{B^2}{A} \tag{8.12}$$

という量を考える．これを変分すると，

$$\begin{aligned}\delta I_2 &= -\frac{1}{A^2}\{2AB\delta B - B^2\delta A\} \\ &= -\frac{B}{A^2}\{A(2\delta B - \delta A) - (B - A)\delta A\}\end{aligned} \tag{8.13}$$

となるから，やはり式 (8.2) が成り立つ場合，

$$A = B \tag{8.14a}$$

$$\delta A = 2\delta B \tag{8.14b}$$

だから，式 (8.13) の右辺は 0，つまり，I_2 は停留値をとる．その停留値は式 (8.14a) により，前と同じく，

$$I_{\text{stationary}} = -B = k\tan\delta_\ell(k) \tag{8.15}$$

である．したがって，停留値が $k\tan\delta$ になるという了解のもとに，単に，

$$\text{“}k\tan\delta_\ell(k)\text{”} = -\frac{B^2}{A} \tag{8.16}$$

を，散乱問題の変分法の式と考えてよい．

この表現 (8.16) は，前の式 (8.5) や (8.11) と比べて，少々便利な点がある．それは，式 (8.6) の右辺の分子と分母には，ともに $\chi_\ell(k,\ r)$ が 2 次ではいっていることである．したがって，$\chi_\ell(k,\ r)$ の試し関数の規格化がきかないので，規格化は無視してもよいからである．しかし，これにも欠点がある．それは，低エネルギー散乱を扱うために，右辺を k の “べき” に展開することができないからである．

Schwinger はそこで，式 (8.16) の分子と分母をひっくり返し，

$$\text{“}k\cot\delta_\ell(k)\text{”} = -\frac{A}{\frac{1}{k^2}B^2} \tag{8.17}$$

を提唱した．すぐわかるように，

$$\delta\text{“}k\cot\delta_\ell(k)\text{”} = -\frac{A}{\frac{1}{k^2}B^2}\{(B-A)\delta A - A(2\delta B - \delta A)\} \tag{8.18}$$

だから，式 (8.2) あるいは式 (8.14) が成り立つ場合には，やはり左辺は 0，つまり式 (8.17) の左辺が停留値をとり，その停留値は $k\cot\delta$ である．

Schwinger の表現 (8.17) は，上に述べた規格化不要の利点があり，しかも低エネルギー散乱への応用も可能である．表現 (8.17) の右辺を，k でべき展開することが可能なのである．低エネルギーでは，角運動量 $\ell=0$ がおもな寄与をするから，通常 $\ell \neq 0$ を省略する．式 (8.17) の分子と分母を別々に k^2 のべきで展開して整理すると，むずかしくはないが，少々しんどい計算のあと，

$$\text{“}k\cot\delta_0(k)\text{”} = -\frac{1}{a} + r_0k^2 + \cdots \tag{8.19}$$

というかたちにまとまる．a と r_0 とは原理的に計算できる量だが，これらはむしろ，低エネルギー散乱を分析するためのパラメーターとして使われることが多い．a のことを**散乱の長さ** (scattering length)，また r_0 のことを**有効距離** (effective range) とよぶ．両方とも長さの次元をもっている．

これらのパラメーターが有効なのは，

$$k^2ar_0 \ll 1 \qquad kr_0 \ll 1 \tag{8.20}$$

の範囲である．

散乱半径 a の意味を知るために，式 (8.19) の右辺第 2 項以上を無視すると，

$$\delta_0 \approx ka \tag{8.21}$$

$$\therefore \quad f = \frac{1}{2ik}\{\exp(2i\delta_0) - 1\} \approx -a \tag{8.22}$$

したがって，散乱の微分断面積は VIII 章の式 (3.17) により，

$$\mathrm{d}\sigma = a^2\mathrm{d}\Omega \tag{8.23}$$

となる．

演習問題 X

1.　方程式

$$\ddot{\mathrm{x}} + \omega_0^2 x + \varepsilon x^3 = 0$$

を与える Lagrangian を作れ．

2. Lagrangian (2.8) から $x^{(1)}$ と $x^{(2)}$ の運動方程式を導いてみよ． m_1, m_2 は，ともに0でない正の数である．

3. 前問の Lagrangian から，式 (2.11) を使って Hamiltonian (2.12) を導いてみよ．

4. 式 (3.1) の Euler-Lagrange の方程式を作り，微分方程式 (3.2) を導いてみよ．

5. Hermite の微分方程式 (3.4) から，どうやったら式 (3.5a) が得られるだろうか？

6. 試し関数として $u(x) = ax + bx^3$ をとり，式 (4.5) が停留値をとるように，a と b を定めてみよ．

7. 式 (3.6) から Euler-Lagrange の方程式を作り，式 (3.4) が再現されることを確めよ．

8. 式 (4.4) の左辺を，λ で最初の 3 項まで正確に展開し， H_0, H_1, H_2 を求めよ．

9. 式 (4.8) の左辺を，第 3 項まで正確に展開し， P_0, P_1, P_2 を求めよ．

10. 式 (4.9) から Euler-Lagrange の方程式を作り，式 (4.6) が再現されることを確認せよ．

11. 方程式 (4.17) が満たされるとき，停留値をとるような I を作れ．

12. $x = \cos\theta$ とおき，Tschebyscheff の方程式 (4.28) を， θ に関する微分方程式に書き直すとどうなるか？ その微分方程式の解を θ の関数として求めよ．

13. Tschebyscheff の多項式の表示 (4.34) は，前問の解答から得られる．式 (4.34) を前問の結果から導いてみよ．

14. 式 (5.4) を用い，式 (5.3) から (5.3′) を導いてみよ．

15. 大正準集合の理論では，エネルギーと粒子数の平均値を指定する．この場合の確率分布関数を，“S” を最大にするようにして求めてみよ．

16. Helmholtz の自由エネルギー (6.17) を最小にするような確率分布関数は，式 (6.14) に一致することを確めよ．

17. 試し関数 (7.21) を (7.1) に代入し，Bと γ を，I が停留値をとるように決めてみよ．問題 8 の $H_1(x)$ との関係は？

18. 変分法において，試し関数と正確な関数の差が ε のオーダーであるとき，固有値の誤差は ε^2 のオーダーである．このことを証明せよ．

演習問題ヒント

演習問題 VI

1.　$AB = BA$ から、各行各列を等しいとおいて比べてみる。すると、

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ -\dfrac{a_{21}}{a_{12}} b_{12} & b_{11} + \dfrac{a_{22} - a_{11}}{a_{12}} b_{12} \end{bmatrix}$$

のとき、A、B は交換する。

2.　A の第 2 行は、第 1 行の 2 倍になっている。したがって、$\varDelta = 0$ のはず。

3.　式 (2.11′) を使うと、

$$\frac{\partial\ \varDelta_A}{\partial\ a_{21}} = -(a_{12}a_{33} - a_{13}a_{32})$$

$$\frac{\partial\ \varDelta_A}{\partial\ a_{22}} = (a_{11}a_{33} - a_{31}a_{12})$$

$$\frac{\partial\ \varDelta_A}{\partial\ a_{23}} = -(a_{11}a_{32} - a_{31}a_{12})$$

したがって、たとえば、

$$a_{2k}\frac{\partial\ \varDelta_A}{\partial\ a_{2k}} = \varDelta_A, \qquad a_{1k}\frac{\partial\ \varDelta_A}{\partial\ a_{2k}} = a_{2k}\frac{\partial\ \varDelta_A}{\partial\ a_{1k}} = 0$$

となる。

4.　まず

$$\varDelta_A \varepsilon_{\ell mn} \cdots = \varepsilon_{ijk} \cdots a_{i\ell} a_{jm} a_{kn} \cdots$$

に気をつける。これを証明するには、右辺が $\ell, m, n, \cdots$ について全反対称であることをいい、それから $\ell = 1,\ m = 2,\ n = 3, \cdots$ とおいてやればよい。すると、

$$\begin{aligned}\det(AB) &= \varepsilon_{ijk\ldots}(a_{i\ell}b_{\ell 1})(a_{jm}b_{m2})(a_{kn}b_{n3})\cdots \\ &= \varepsilon_{ijk\ldots}a_{i\ell}a_{jm}a_{kn}\cdots b_{\ell 1}b_{m2}b_{n3}\cdots \\ &= \Delta_A \varepsilon_{\ell mn\ldots}b_{\ell 1}b_{m2}b_{n3}\cdots = \Delta_A\Delta_B\end{aligned}$$

5.

$$A^{-1}AB = B \quad \therefore \qquad B^{-1}A^{-1}AB = I$$

6.

$$A = \frac{1}{2}(A + A^T) + \frac{1}{2}(A - A^T)$$

7. このとき

$$a_{ij} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \therefore \qquad \begin{aligned} x' &= x\cos\theta + y\sin\theta \\ y' &= -x\sin\theta + y\cos\theta \\ z' &= z \end{aligned}$$

8. 直交行列は、

$$a_{ik}a_{jk} = \delta_{ij}$$

を満たす。これは、$n \times n$ 個の量に対する $\dfrac{n \times n - n}{2} + n$ 個の条件である。したがって、

$$n \times n - \left\{\frac{n \times n - n}{2} + n\right\} = \frac{1}{2}n(n-1)$$

個が独立にとれる。

9.

$$(UV)^\dagger = V^\dagger U^\dagger = V^{-1}U^{-1} = (UV)^{-1}$$

10. 展開公式 (8.3) と、

$$[(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{e})^2]_{ij} = \delta_{ij} - e_i e_j$$

$$\Big[(\boldsymbol{T}\cdot e)^3\Big]_{ij} = \Big[(\boldsymbol{T}\cdot\boldsymbol{e})\Big]_{ij} = -i\varepsilon_{ijk}e_k$$

を用いる。

11.

$$\begin{aligned}\frac{I + i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{I - i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}} &= \frac{I + i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{I - i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}}\,\frac{I + i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}}{I + i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}} \\ &= \frac{1}{1-\boldsymbol{\beta}^2}\Big[I - \boldsymbol{\beta}^2 + 2i\boldsymbol{\beta}\cdot\boldsymbol{\sigma}\Big]\end{aligned}$$

12.

$$\det(T_3-\lambda I)=\begin{vmatrix}-\lambda & -i & 0\\ i & -\lambda & 0\\ 0 & 0 & -\lambda\end{vmatrix}=(-\lambda)^3+\lambda=0$$

13. ノートIの p.61 を見よ。

14.

$$U^{-1}T_3U=\begin{bmatrix}a & 0 & 0\\ 0 & b & 0\\ 0 & 0 & c\end{bmatrix}\quad U=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{i}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

$$a=1\quad b=-1\quad c=0$$

15.

$$U=\begin{bmatrix}\cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2}^{-i\phi}\\ \sin\frac{\theta}{2}e^{i\phi} & \cos\frac{\theta}{2}\end{bmatrix}e^{i\zeta}$$

で変換すると、

$$U^{-1}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{x}U=r\sigma_3$$

16.

$$a_{ij}=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}$$

したがって、

$$\det(A-\lambda I)=\begin{vmatrix}\cos\theta-\lambda & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta-\lambda\end{vmatrix}=\lambda^2-2\lambda\cos\theta+1=0$$

$$\therefore\quad \lambda=e^{\pm i\theta}$$

$$\therefore\quad U^{-1}AU=\begin{bmatrix}e^{i\theta} & 0\\ 0 & e^{-i\theta}\end{bmatrix}$$

を与えるユニタリー変換は、

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ i & -i\end{bmatrix}$$

となる。

17. もし

$$U^{-1}HU = H_D \qquad U^{-1}KU = K_D$$

となったとすると、右辺は交換する。したがって、H と K も交換しなければならなくなる。

18. 行列の対数を定義した式より、

$$\delta \ln(I + \lambda K) = (I + \lambda K)^{-1}\delta\lambda K$$

$$\therefore \qquad \mathrm{Tr}[\delta \ln(I + \lambda K)] = \delta\,\mathrm{Tr}[\ln(I + \lambda K)] = \mathrm{Tr}[(I + \lambda K)^{-1}\delta\lambda K]$$

しかし、定義により、

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}[(I + \lambda K)^{-1}\delta\lambda K] &= \frac{1}{\det(I + \lambda K)}\frac{\partial \ \det(I + \lambda K)}{\partial \ a_{ij}}\delta a_{ij} \\ &= \delta \ln[\det(I + \lambda K)]\end{aligned}$$

$$\therefore \qquad \mathrm{Tr}[\ln(I + \lambda K)] = \ln[\det(I + \lambda K)]$$

$$\therefore \qquad \exp \mathrm{Tr}[\ln(I + \lambda K)] = \det(I + \lambda K)$$

19. 式 (8.2′) から、

$$\begin{aligned}U = \frac{1}{I - i(K_1 + K_2)} &= \frac{1}{I - iK_1} + \frac{1}{I - iK_1}iK_2\frac{1}{I - i(K_1 + K_2)} \\ &= U_1 + U_1 iK_2 U\end{aligned}$$

演習問題 VII

1. 略

2. J_1J_2, J_2J_3, J_3J_1を順次計算する。次にそれらのエルミート共役をとると、J_2J_1などがわかる。

3.

$$[\boldsymbol{J}^2,\ J_i] = J_j[J_j,\ J_i] + [J_j,\ J_i]J_i = i\varepsilon_{jik}J_jJ_k + i\varepsilon_{jik}J_kJ_j = 0$$

4. 定義を用いて直接計算するほかにない。

5. 略

6.

$$\mathrm{Tr}[AB] = \sum_i \left\{ \sum_j a_{ij} b_{ij} \right\}$$

しかし、

$$\mathrm{Tr}[BA] = \sum_i \left\{ \sum_j b_{ij} a_{ij} \right\} = \sum_j \left\{ \sum_i a_{ij} b_{ji} \right\}$$

2つの和の順序の交換が含まれているから、有限行列では問題はないが、無限行列では上の2式は必ずしも同じではない。

7. 略

8.

$$u^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad u^{(-1)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad u^{(0)} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

9. VI 章問題 14 を見よ。

10. 式 (6.22) のほうは、

$$\left|\frac{3}{2}; m_+\right\rangle \sqrt{\frac{1}{3}m_+ + \frac{1}{2}} \left|1; m_+ - \frac{1}{2}\right\rangle \left|\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\right\rangle$$
$$+ \sqrt{-\frac{1}{3}m_+ + \frac{1}{2}} \left|1; m_+ + \frac{1}{2}\right\rangle \left|\frac{1}{2}; -\frac{1}{2}\right\rangle$$

11. $\mathcal{S}^\dagger$を作り、$\mathcal{S}$ とかけあわせると I になる。

12. VI 章の式 (8.14) を使う。

13.

$$U^{-1} a_1 U = a_1 + i f_1 [a_1,\ a_1^\dagger] + \cdots$$
$$= a_1 + i f_1$$
$$\therefore \qquad a_1 U = U(a_1 + i f_1)$$

14.

$$[S,\ J_i] = 0 \quad \therefore \qquad [S,\ J_{\pm}] = 0 \quad [S,\ J_3] = 0$$

これらから、

$$\langle j'; m' | S | j,\ m \rangle = \delta_{j', j} \delta_{m', m}\, s(j,\ m)$$

しかし、

$$\langle j; m|SJ_+ - J_+S|j, m-1\rangle = 0$$

$$\therefore \qquad s(j,\ m) = s(j,\ m-1)$$

演習問題 VIII

1.　式 (1.1) に $\psi^\dagger$ をかけ、式 (1.2) に ψ をかけて引き算する。

2.　$\alpha - \dfrac{\hbar}{2m} \equiv -\omega$ とおけばよい。

3.　式 (1.1) において、

$$\psi(\boldsymbol{x},\ t)\ \text{Ⓜ}\ \exp(-iEt/\hbar)\psi(\boldsymbol{x})$$

とおき、Green 関数 (3.7) を用いて積分形に直す。

4.　略

5.　たとえば、内山竜雄、西山敏之、“量子力学演習”（共立出版）を見よ。θ の小さいところだけで干渉が起こる。

6.　略

7.　略

8.　略

9.　式 (6.2), (6.3) を使う。

10.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\theta(r - r') = \delta(r - r')$$

に注意する。

11.

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r \mathcal{S}_0^2(kr) \exp(-\kappa r) = \int_0^\infty \mathrm{d}r \sin^2 kr \exp(-\kappa r) = \frac{2k^2}{\kappa(\kappa^2 + 4k^2)}$$

12.　中心に向かって波が引かれると、いわば “波のしわ” が多くなる。したがって $\delta > 0$.

13.　χ のかわりに $\chi \cos\delta$ をとって、全体の規格化を変えればよい。

演習問題 IX

1. これができなかったら.....。

2. 式 (3.6) を使って、x や p を a や $a^\dagger$ で表すと、たとえば、

$$x^2 = \frac{\hbar}{2\omega}\{a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a\}$$

$$\langle 0|x^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2\omega}\langle 0|aa^\dagger|0\rangle = \frac{\hbar}{2\omega}\langle 0|\{a^\dagger a + 1\}|0\rangle = \frac{\hbar}{\omega}$$

3. 前問と同じように計算する。

4.

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega}}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2}}\begin{bmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

ここでは任意の位相を 0 とおいたが、角運動量のときと同じで、x や p の運動の自由度は、位相の中に入っているということを忘れないように。

5.

$$i\hbar\dot{x} = [x,\ H] = i\omega(xxp - xpx) = 2i\omega x^2 p = i\hbar p$$

$$\therefore \quad \dot{x} = p$$

同様にして、

$$\dot{p} = -\omega^2 x$$

6. 式 (4.2) から、

$$a_{\boldsymbol{k}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V \mathrm{d}^3 x \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}, t)$$

$$a^\dagger_{\boldsymbol{k}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V \mathrm{d}^3 x \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, t)$$

$$\therefore \quad \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_k a^\dagger_{\boldsymbol{k}}(t) a_{\boldsymbol{k}}(t)$$

$$= \frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3 x \int_V \mathrm{d}^3 y \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}) \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) \psi^\dagger(\boldsymbol{y},\ t)\psi(\boldsymbol{x},\ t)$$

$$= \frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3 x \int_V \mathrm{d}^3 y \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\hbar^2}{2m}\{\nabla_y \exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}) \cdot \nabla_x \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\} \psi^\dagger(\boldsymbol{y},\ t)\psi(\boldsymbol{x},\ t)$$

部分積分して、

$$= \frac{1}{V}\int_V \mathrm{d}^3 x \int_V \mathrm{d}^3 y \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\hbar^2}{2m}\left\{\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{y}) \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x})\right\} \nabla_y \psi^\dagger(\boldsymbol{y}, t) \cdot \nabla_{\boldsymbol{x}}\psi(\boldsymbol{x}, t)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_V \mathrm{d}^3 x \int_V \mathrm{d}^3 y \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}) \nabla_y \psi^\dagger(\boldsymbol{y}, t) \cdot \nabla_x \psi(\boldsymbol{x}, t)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int_V \mathrm{d}^3 x\, \nabla\psi^\dagger(\boldsymbol{x}, t) \cdot \nabla\psi(\boldsymbol{x}, t)$$

7. 同一時刻では、問題中の式は 0 になる。

8. Fourier 逆変換

$$a_{\boldsymbol{k}}(t) = \frac{1}{\sqrt{V}} \int_V \mathrm{d}^3 x \exp(-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}) u(\boldsymbol{x}, t)$$

を使うとよい。

9. 問題 8 の Fourier 逆変換を使い、問題 7 と同様に計算する。

10. 略

11.

$$[\pi(\boldsymbol{x},\ t),\ u(\boldsymbol{x}',\ t)] = -i\hbar\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')$$

$$[\pi(\boldsymbol{x},\ t),\ \pi(\boldsymbol{x}',\ t)] = [u(\boldsymbol{x},\ t), u(\boldsymbol{x}',\ t)] = 0$$

12. 略

13. Maxwell 方程式を使って、まともに計算するしか手がない。

14.

$$\boldsymbol{J}^{(\mathrm{e})} = c^2 \boldsymbol{J}^{(\mathrm{p})}$$

と、よく知られた関係 $E = mc^2$、すなわち $E\boldsymbol{v} = c^2 m\boldsymbol{v}$ とを比較してみよ。

15. $\boldsymbol{e}^{(r)}$ $(r = 1, 2)$ が $\boldsymbol{k}$ と直交していることに注意。

16.

$$\boldsymbol{k} \times (\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{e}^{(r)}) = -k^2 e^{(r)} + \boldsymbol{k}(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{e}^{(r)}) = k^2 \boldsymbol{e}^{(r)}$$

17. ノートIの p.149 の議論参照。光のかたよりからくる因子 2 を忘れないように。

18. 略

19. 単なる微分の計算。

演習問題 X

1.

$$L = \frac{1}{2}(x^2 - \omega_0^2 x^2) - \frac{\varepsilon}{4} x^4$$

2. Euler-Lagrange 方程式をたんねんに計算する。たとえば、

$$\frac{\partial}{\partial\ t} \frac{\partial\ L}{\partial\ \dot{\boldsymbol{x}}^{(1)}} - \frac{L}{\partial\ \boldsymbol{x}^{(1)}} = m_1 \dot{\boldsymbol{x}}^2 - \frac{m_1}{m_2} \nabla^{(1)} V(|\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(2)}|)$$
$$= \frac{m_1}{m_2} \{m_2 \ddot{\boldsymbol{x}}^{(2)} + \nabla^{(2)} V(|\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x}^{(2)}|)\} = 0$$

3. 式 (2.11) により、

$$\dot{\boldsymbol{x}}^{(1)} = (m_2 - m_1) \frac{1}{m_1^2} p^{(1)} + \frac{1}{m_1} p^{(2)}$$
$$\dot{\boldsymbol{x}}^{(2)} = \frac{1}{m_1} p^{(1)}$$

これらを使って、時間微分を消去すると、式 (1.12) を得る。

4.

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ u'(x)} = 2f(x)u'(x) + f(x)\alpha(x)u(x)$$

5. 式 (3.2) と式 (3.4) を比べると、

$$\frac{f'(x)}{f(x)} = -2\gamma^2 x$$

が得られる。これを積分すると式 (3.5a) になる。

6.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \exp(-x^2) = \sqrt{\pi}\quad \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ x^2 \exp(-x^2) = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ x^4 \exp(-x^2) = \frac{3}{4}\sqrt{\pi}\quad \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ x^6 \exp(-x^2) = \frac{15}{8}\sqrt{\pi}$$

を用いると、

$$I = \sqrt{\pi}\left\{a^2 + (3ab - na^2) + \frac{3}{4}(ab^2 - 4abn) - \frac{15}{4}nb^2\right\}$$

したがって

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ a} = \frac{\partial\ I}{\partial\ b} = 0$$

とおくと、

$$(1-n)\{2a+3b\} = 0$$

$$2(1-n) + (9-5n)b = 0$$

$$\therefore\qquad n = 1\quad a \neq 0\quad b = 0$$

$$n = 3\quad a = -12\quad b = 8$$

7.

$$\frac{\partial\ I}{\partial\ u'(x)} = \exp(-\gamma^2 x^2)\{2u'(x) + \alpha(x)u(x)\}$$

8.

$$H_0(x) = 1,\quad H_1(x) = 2x,\quad H_2(x) = 4x^2 - 2$$

9.

$$P_0(x) = 1,\quad P_1(x) = x,\quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 2)$$

10. 略

11.

$$\frac{\cos\theta}{\sin\theta} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\ln\sin\theta$$

$$I = \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \left[\frac{\partial\ Y^*}{\partial\ \theta}\frac{\partial\ Y}{\partial\ \theta} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\partial\ Y^*}{\partial\ \phi}\frac{\partial\ Y}{\partial\ \phi} + \ell(\ell+1)Y^*Y\right]$$

$$+\lambda \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \left[Y^*\frac{1}{i}\frac{\partial\ Y}{\partial\ \phi} - mY^*Y\right]$$

$$I = \int_0^{\pi} \mathrm{d}\theta \sin\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi \left[\frac{\partial\ Y^*}{\partial\ \theta}\frac{\partial\ Y}{\partial\ \theta} + m^2\frac{\cos\theta}{\sin\theta}Y^*Y + \ell(\ell+1)Y^*Y\right]$$

12.

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\theta^2}+n^2\right]T_n(\cos\theta)=0$$

13.

$$T_n(x)=\cos(n\cos^{-1}x)=\frac{1}{2}\{\exp(in\theta)-\exp(-in\theta)\}$$

に注意。

14.　略

15.　Lagrange の未定係数項として、

$$\sum_{\Gamma,N}E(\Gamma,\ N)f_G(\Gamma,\ N)-\langle E\rangle_G=0$$

$$\sum_{\Gamma、N}Nf_G(\Gamma,\ N)-\langle N\rangle_G=0$$

を考慮する。

16.

$$\sum_{\Gamma}f_c(\Gamma)=1$$

を忘れないように。

17.

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\ x^4\exp(-\gamma^2x^2)=\frac{12}{\gamma^4}\sqrt{\pi}$$

18.

$$\psi_0\equiv u_0+\varepsilon u_1$$

とおいて、たとえば、

$$I=\frac{\displaystyle\int\mathrm{d}^3x\psi_0^\dagger\mathcal{H}\psi_0}{\displaystyle\int\mathrm{d}^3x\psi_0^\dagger\psi_0}$$

に停留値をとらせるようにする。すると停留値は、

$$I=E_0+\varepsilon^2E_1$$

となる。E_0 が正確な値である。

索　引

欧文索引

著者紹介

高橋　康（たかはし　やすし）

1951年　名古屋大学理学部卒業
現　在　Professor Emeritus, Department of Physics, University of Alberta
Fellow of Royal Society of Canada
Fellow of American Physical Society
Member of Royal Irish Academy

NDC421　156p.　21cm

物理数学ノート II

1993年12月1日　第1刷発行

著　者　高橋　康
発行者　野間佐和子
発行所　株式会社　講談社
〒112-01　東京都文京区音羽 2-12-21
販売部　(03)5395-3624
製作部　(03)5395-3615
編　集　株式会社　講談社サイエンティフィク
代表　中島信也
〒162 東京都新宿区新小川町 9-25　日商ビル
編集部　(03)3235-3701

印刷所　株式会社平河工業社・半七写真印刷工業株式会社
製本所　株式会社国宝社

落丁本・乱丁本は，講談社書籍製作部宛にお送り下さい．
送料小社負担にてお取替えします．なお，この本の内容について
のお問い合わせは講談社サイエンティフィク編集部宛にお願いい
たします．定価はカバーに表示してあります．

Printed in Japan

ISBN4-06-153208-1　(KS)